

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

УДК 539.216 539.22 538.91-405 548 620.18

ББК Г 534

Т29

Т29 Тезисы докладов International Workshop «Multiscale Biomechanics and Tribology of Inorganic and Organic Systems», Международной конференции «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций» и VIII Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, посвященной 50-летию основания института химии нефти «Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа» 1–5 октября 2019 года, Томск, Россия. – Томск: Издательский Дом ТГУ, 2019. – 820 с.

ISBN 978-5-94621-841-2

Издание содержит тезисы Международного междисциплинарного симпозиума «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций», в рамках которого проводятся: International Workshop «Multiscale Biomechanics and Tribology, of Inorganic and Organic Systems», Международная конференция «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций» и VIII Всероссийская научно-практическая конференция с международным участием, посвященная 50-летию основания института химии нефти «Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа». В книге отражены аспекты решения фундаментальных научных проблем, связанных с разработкой и применением новых подходов к созданию перспективных материалов в интересах развития новых производственных технологий, освоения космического пространства, в том числе дальнего космоса, развития электроники, атомной энергетики, нефтегазового комплекса, медицины, транспорта и др. Книга адресована научным сотрудникам, инженерам, аспирантам и специалистам, занимающимся вопросами физической мезомеханики, разработки наноструктурных объемных и наноразмерных материалов, наноструктурированием поверхностных слоев, тонкими пленками и покрытиями, нанотехнологиями, компьютерным конструированием новых материалов и технологий их получения, технологиями упрочнения и поверхностной обработки материалов, неразрушающими методами контроля.

Публикуется в авторской редакции.

УДК 539.216 539.22 538.91-405 548 620.18

ББК Г 534

Мероприятие проведено при финансовой поддержке:

Договор с РФФИ № 19-08-20058\19 от 13.03.2019.

Соглашение № 075-02-2019-1515 от 14.06.2019.

ISBN 978-5-94621-841-2 © Институт химии нефти СО РАН, 2019

© Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 2019

**INTERNATIONAL WORKSHOP
«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

CONFERENCE ORGANIZERS

Technische Universität, Berlin, Germany

Technische Universität, Braunschweig, Germany

Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch, Russian
Academy of Sciences, Tomsk, Russia

INTERNATIONAL ORGANIZERS

Georg-Peter Ostermeyer
Braunschweig, Germany

Valentin Popov
Berlin, Germany

Evgeny Shilko
Tomsk, Russia

Chairman

Popov Valentin Leonidovich
Berlin, Germany

Workshop Secretary

Timkin V.N.

INTERNATIONAL WORKSHOP
**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

DOI: 10.17223/9785946218412/1

THE ROLE OF ACIDE-BASE PROPERTIES OF NANOPARTICLES IN CANCER CELLS VIABILITY

¹Lozhkomoev A.S.

¹Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, Russia

Tumor acidity is caused by increase in protons generation from the anaerobic metabolism of cancer cells through the overexpression of M2-PK, a dimeric isoenzyme of pyruvate kinase [1]. Consequently, tumors have a significantly lower extracellular pH (~6.5–7.1) in comparison to normal tissues (7.4), due to the maintenance of proton efflux pumps [2].

Recent studies have shown that altering the extracellular pH kills tumor cells, reduces cancer metastasis, and reduces the resistance of tumor cells to drugs. This allows us to consider this approach as a promising treatment for cancer, including suboptimal concentrations of chemotherapy drugs [3].

In the present work, the effect of agglomerates of nanosheets of structures based on aluminum hydroxides with different phase composition on the viability of tumor cells was studied.

Studies have shown that the synthesized nano-sheet structures based on oxide and hydroxide phases of aluminum have antitumor properties. At the same time, it was found that γ -Al₂O₃ nanostructures exhibit more pronounced antitumor properties on 4 lines of tumor cells from the five studied (Fig. 1 a).

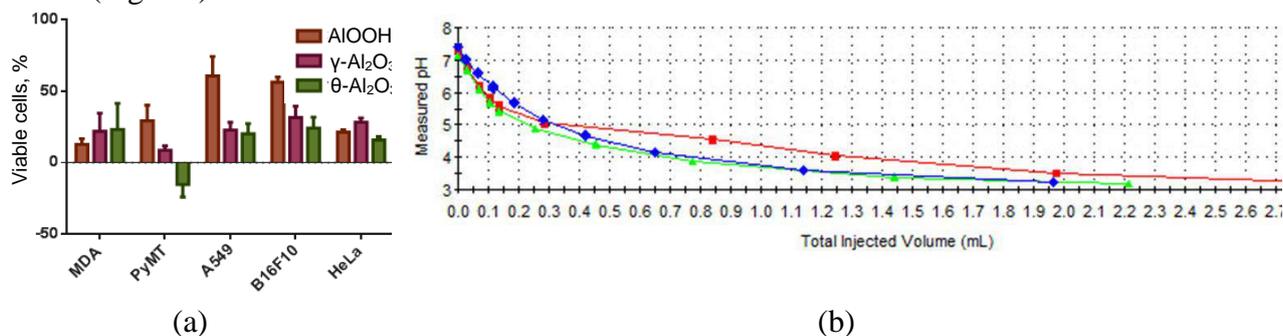


Fig. 1. Cell viability (a) and isoelectric titration graphs (b) of AlOOH (blue curve), θ -Al₂O₃ (green curve) and γ -Al₂O₃ (red curve)

This may be due to the fact that γ -Al₂O₃ nanostructures adsorb more protons than AlOOH and θ -Al₂O₃. Before reaching pH3.2, an aqueous suspension of synthesized nanostructures with a concentration of 5 mg/ml, 1.95 ml of a 0.01 M HCl solution was required for AlOOH, 2.22 ml for θ -Al₂O₃, and 2.84 ml for γ -Al₂O₃.

1. Sonveaux P., Végran F., Schroeder T., Wergin M. C., Verrax J., Rabbani Z. N., De Saedeleer C. J., Kennedy K. M., Diepart C., Jordan B. F., Kelley M. J., Gallez B., Wahl M. L., Feron O., Dewhirst M. W. Targeting lactate-fueled respiration selectively kills hypoxic tumor cells in mice. // *The Journal of clinical investigation*, 2008. V118. P. 3930–3942.
2. Gillies R., Raghunand N., Garcia-Martin M., Gateby R. pH imaging. // *IEEE Engineering in medicine and biology magazine*, 2004. V. 23. P. 57–64.
4. Walsh M., Fais S., Spugnini E. P., Harguindey S., Izneid T. A., Scacco L., Williams P., Allegrucci C., Rauch C., Omran, Z. Proton pump inhibitors for the treatment of cancer in companion animals. // *Journal of Experimental & Clinical Cancer Research*, 2015. V. 34. P. 93.

DOI: 10.17223/9785946218412/2

ANTICANCER ACTIVITY OF CRUMPLED ALUMINUM NANOSHEETS THROUGH DISRUPTION OF ION BALANCE IN TUMOR MICROENVIRONMENT

¹Mikhaylov G., ²Lerner M.I., ²Tsukanov A.A., ²Lozhkomoev A.S., ³Gutmanas E., ⁴Gotman I.,
¹Bratovs A., ¹Turk V., ^{1,5}Turk B., ²Psakhie S.G., ¹Vasiljeva O.

¹*Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia*

²*Institute of Strength Physics and Materials Science, Tomsk, Russia*

³*Technion – Israel Institute of Technology, Haifa, Israel*

⁴*Department of Mechanical Engineering, ORT Braude College, Karmiel, Israel*

⁵*Center of Excellence for Integrated Approaches in Chemistry and Biology of Proteins, Ljubljana, Slovenia*

Despite the progress in medicinal chemistry for cancer treatment, chemotherapy is still a major challenge for patients and doctors. Among newly developed biomedical strategies, nanoparticles have been widely exploited in cancer therapy because of their unique physical and chemical properties. One of the newly emerging areas for potential nanoparticle applications in cancer therapy is based on the fact that cancer cells are particularly sensitive to the changes in intracellular and extracellular ion concentrations¹. Therefore, nanostructures of inorganic materials that affect ion concentrations due to their surface charge and/or adsorption properties² could represent a novel strategy for anticancer therapy. In this respect, the nanostructured boehmite form of aluminum hydroxide seems especially attractive due to its unique combination of an extremely large specific surface area and positive surface charge³. In addition, Al hydroxide is approved for clinical applications and has been used as a human vaccine adjuvant over six decades, with a demonstrated safety profile⁴.

We have shown that Al hydroxide, a well-studied antacid agent and selective adsorbent for many chemicals⁵, when synthesized in the form of crumpled and radially assembled nanosheets, causes tumor growth inhibition and cell apoptosis due to a significant ion imbalance in the tumor microenvironment (see Fig.1).

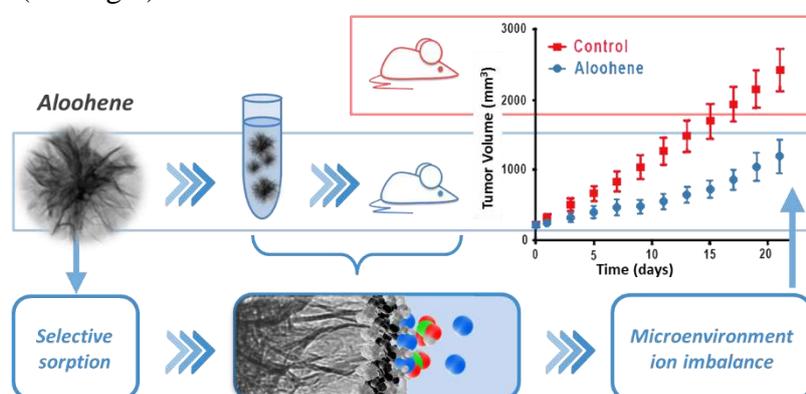


Fig. 1. The principle of tumor treatment strategy through dysregulation of ion balance in the tumor microenvironment using a nanostructured boehmite form of aluminum hydroxide

Al nanoparticles were produced by the electric explosion of Al wires resulted in crumpled nanosheets with the lateral size 400 nm or less and the thickness of 2-5 nm. The synthesized agglomerates of radially assembled crumpled AlOOH nanosheets have been termed Alohene, referring to its chemical formula AlOOH. Alohene has a high specific surface area of 284 m²·g⁻¹ with the width of the slit-shape pores between the crumpled nanosheets 4–19 nm.

The unique anticancer properties of AlOOH nanomaterial were demonstrated on three different cancer cells resulting in 30-37 % decrease in proliferation in all tested cell lines. Moreover, it was shown that pretreatment of PyMT breast cancer cells with Alohene significantly enhanced the cytotoxicity of the anticancer drug doxorubicin demonstrating the synergistic effect, as confirmed by the method of isoboles based on the concept of dose equivalence. Furthermore, the antitumor effect of Alohene administered *in vivo* has been shown on two different mouse tumor models demonstrating the compound versatility. The intratumoral injections of Alohene resulted in a

significant reduction of tumor growth as compared to the non-treated mice⁶. Finally, using the direct molecular dynamic stimulation we have confirmed that Aloohene can alter ion concentration in the perimembranous space and thereby affect ion transport, tumor cell nutrition, and vital cellular functions thus providing a plausible explanation for the anticancer effect of this type of nanomaterials.

In summary, our study demonstrates that nanoparticle-based systems capable of disturbing tumor microenvironment extracellular ion balance can represent a novel type of cancer treatment strategy that should be further explored.

1. Brisson, L.; Gillet, L.; Calaghan, S.; Besson, P.; Le Guennec, J. Y.; Roger, S.; Gore, J., Na(V)1.5 enhances breast cancer cell invasiveness by increasing NHE1-dependent H(+) efflux in caveolae. // *Oncogene* 2011, V. 30 (17), P. 2070-6.
2. Warren, E. A.; Payne, C. K., Cellular binding of nanoparticles disrupts the membrane potential. // *RSC Adv* 2015, V. 5 (18), P. 13660-13666.
3. Lozhkomoev, A. S.; Glazkova, E. A.; Bakina, O. V.; Lerner, M. I.; Gotman, I.; Gutmanas, E. Y.; Kazantsev, S. O.; Psakhie, S. G., Synthesis of core-shell AlOOH hollow nanospheres by reacting Al nanoparticles with water. // *Nanotechnology* 2016, V. 27 (20), P. 205603.
4. Marrack, P.; McKee, A. S.; Munks, M. W., Towards an understanding of the adjuvant action of aluminium. // *Nat Rev Immunol* 2009, V. 9 (4), P. 287-93.
5. Tanada, S.; Kabayama, M.; Kawasaki, N.; Sakiyama, T.; Nakamura, T.; Araki, M.; Tamura, T., Removal of phosphate by aluminum oxide hydroxide. // *J Colloid Interface Sci* 2003, V. 257 (1), P. 135-40.
6. Lerner, M. I.; Mikhaylov, G.; Tsukanov, A. A.; Lozhkomoev, A. S.; Gutmanas, E.; Gotman, I.; Bratovs, A.; Turk, V.; Turk, B.; Psakhie, S. G.; Vasiljeva, O., Crumpled Aluminum Hydroxide Nanostructures as a Microenvironment Dysregulation Agent for Cancer Treatment. // *Nano Lett* 2018, V. 18 (9), P. 5401-5410.

DOI: 10.17223/9785946218412/3

PHYSICAL-MECHANICAL PROPERTIES AND MULTILAYER HIERARCHICALLY ORGANIZED STRUCTURE OF Ti-Ta-BASED SURFACE ALLOY SYNTHESIZED ON THE NiTi-SUBSTRATE BY HIGH-CURRENT PULSED ELECTRON BEAM

¹D'yachenko F.A., ¹Meisner S.N., ²Yakovlev E.V., ^{1,3}Semin V.O., ^{1,3}Meisner L.L.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia*

²*Institute of High-Current Electronics SB RAS, Tomsk, Russia*

³*National research Tomsk state university, Tomsk, Russia*

Due to the functional properties of shape memory effect and superelasticity (SME-SE), nickel titanium alloys are used for manufacturing of miniature devices (*actuators*) for microelectromechanical systems (MEMs) in fields of high tech medicine [1]. It is known, that the surface state and its physical-mechanical properties have an important influence on the bulk functional properties of NiTi alloys in miniature devices (from ~1 up to ~100 μm). The most effective methods of surface modification of metal materials are electron beam and ion-plasma treatments. Combination of these methods makes it possible to create on the surface a multilayer hierarchically organized structure that has a high strength and elastic-plastic characteristics. Such structure can be formed by cycles of low-energy high-current pulsed electron beam (LEHCPEB) melting of film-substrate system [2]. This structure is called surface alloy, provide high cohesive force to substrate and improved physical-mechanical properties, unlike conventional physical and chemical deposited films/coatings [3].

In this study, using the LEHCPEB-treatment for formation Ti-Ta surface alloy on the NiTi-substrate, we investigated formed multilayer structure and its physical-mechanical properties.

The substrate material was commercial NiTi alloy (MATEK-SMA, Russia) produced as rolled sheets by vacuum induction melting (VIM). The chemical composition of the alloy is: Ti–55.08 Ni–0.051 C–0.03 O–0.002 N (wt %). The specimens were spark cut (EDM) to dimensions of 10 × 10 × 1 mm, chemically cleaned (acid solution: 3 part HNO₃ + 1 part HF), electrolytically polished (acid solution: 3 part CH₃COOH + 1 part HClO₄) and washed in an ultrasonic bath with a distilled water (duration $t = 15$ min).

The Ti-Ta-based surface alloy was formed on the modified automatic setup “RITM-SP” (Microspлав, Russia) allowing pretreatment by a microsecond LEHCPEB, Ti-Ta film deposition by magnetron sputtering, and electron beam melting in a single vacuum cycle [2]. To avoid cratering and local separation of the Ti-Ta film during pulsed melting the NiTi-substrate was preliminary irradiated with a LEHCPEB at a pulse duration $\tau = 2\text{--}2.5 \mu\text{s}$, beam energy density $E_s = 3.4 \pm 0.7 \text{ J/cm}^2$, and number of pulses $n = 32$. Thereafter, the NiTi-substrate was alternately positioned by a manipulator along the magnetron sputter axis for deposition of Ti₇₀Ta₃₀ (at %) film of ~ 50 nm thickness and along the electron beam axis for pulsed melting of the Ti-Ta-film and NiTi-substrate at regime: $E_s = 2 \pm 0.2 \text{ J/cm}^2$, and $n = 5$. The number of deposition-melting cycles was $N = 20$ so that the melted films were in total no thicker than ~1 μm .

The microstructure in depth of the Ti-Ta-based surface alloy on the NiTi-substrate was examined on a JEM 2100 transmission electron microscope (JEOL, Japan) at an accelerating voltage of 200 kV. Thin foils were prepared from plates ~0.3 mm thick by ion thinning on an EM 09100IS ion slicer (JEOL, Japan). The physical-mechanical properties [4-6] (dynamic microhardness – H_{IT} , Young's modulus - E_{IT} , plasticity characteristic – δ_H , and depth inelastic recovery ratio – η) of the NiTi specimens were examined by instrumented nanoindentation on a Nano Hardness Tester (CSM, Switzerland) with a 4-faceted Vickers pyramid. The load on the indenter increased stepwise from 5 mN to 300 mN.

As a result of surface modification NiTi alloy has unique multilayer hierarchically organized structure that correlates with physical-mechanical properties of the alloy. The highest elasticity, lowest plasticity, and high hardness occur in submicrocrystalline upper layer I of ~200 nm thickness ($H_{IT} \approx 8 \text{ GPa}$, $E_{IT} \approx 95 \text{ GPa}$, $\delta_H \approx 40 \%$, $\eta \approx 50 \%$), which contains Ti-Ta-based α' -martensite and structurally unstable high-temperature β -phase. Amorphous sublayer II of ~400 nm thickness

(H_{IT} decreases from ~7 GPa to ~5 GPa, E_{IT} decreases from ~95 GPa to ~80 GPa, δ_H increases from ~45 % to ~57 %, and η decreases from ~40 % to ~30 %) provides a gradual transition from elastic layer I to dispersedly hardened sublayer III. Composite sublayers III, IV, and V, which are close in thickness and contain grains of average size > 20 nm and < 20 nm, provide a gradual transition of the physical-mechanical characteristics to the close strength values of the NiTi-substrate ($H_{IT} \approx 3$ GPa, $E_{IT} \approx 45$ GPa, $\delta_H \approx 60$ %, $\eta \approx 30$ %).

Electron-ion-plasma treatment and investigation of the structure and physical-mechanical properties of Ti-Ta-based surface alloy on the NiTi-substrate were supported by grant of the Russian Science Foundation No. 18-19-00198 (26.04.2018).

1. Mohd J. J., Leary M., Subic. A., Gibson A. M. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities // *Materials and Design*, 2014. V. 56. P. 1078–1113.
2. Markov A. B., Mikov A. V., Ozur G. E., Padei A. G. A ПИТМ-СП facility for the surface alloying // *Instruments and Experimental Techniques*, 2011. V. 54. P. 862–866.
3. Poate J. M., Foti G., Jacobson D. C. Surface modification and alloying by laser, ion and electron beams // Springer US, 1983. 414 p.
4. Pharr. G.M., Oliver W.C. Measurement of thin film mechanical properties using nanoindentation // *MRS Bulletin*, 1992. V. 17. P. 28–33.
5. Milman Yu. V. Plasticity characteristic obtained by indentation // *Journal of Physics D*, 2008. V. 41. P. 074013(1–9).
6. Crone W. C., Shaw G. A., Stone D. S., Johnson A. D., Ellis A. B. Shape recovery after nanoindentation of NiTi films // *Society for Experimental Mechanics*, 2003. P. 1–6.

DOI: 10.17223/9785946218412/4

**THE DOUBLE DEGREE MASTER PROGRAM IN ENGINEERING SCIENCE (DDMPES)
BETWEEN THE POLYTECHNIC UNIVERSITIES OF TOMSK AND BERLIN**

Willert E.

Technische Universität Berlin, Berlin, Germany

The talk will be devoted to a small but important aspect of Professor Sergey G. Psakhie's organizational activities: the Double Degree Master Program in Engineering Science (DDMPES) between Technische Universität Berlin (TUB) and Tomsk Polytechnic University (TPU). DDMPES is an academic exchange programme, existing since 2007, for master students in Engineering Science. As for many academic exchange projects, one of its main purposes is the improvement and strengthening of the connection between Russian and German culture, education and research. Especially in current times of political alienation between the Russian Federation and many "Western" countries, maintaining and fostering the centuries-old academic and scientific relations between Russia and Germany is, of course, of tremendous importance for the mutual understanding and cooperation and thus, in final consequence, for peace and wealth. Moreover, as a successful graduate of the programme I can say, that the DDMPES has greatly influenced and enriched many of its participants, both personally and professionally.

On the other hand the programme faced (and faces) difficulties, the characterization and analysis of which is necessary to continue its success.

During the talk, the aims, structure and history of the DDMPES will, of course, be laid out. However, the focus of the presentation will be on the influence and outcomes of the programme. The object of analysis is therefore mainly related to a certain detail of social reality. Hence, for this purpose empiric, qualitative studies will be performed in the form of interviews with the co-organizer of the programme, Professor Valentin L. Popov, as well as with several Russian and German participants. The latter interviews with former participants are in written form, based on a questionnaire covering, among others, preparation for the academic exchange, differences in education between TPU and TUB, specific memories and the subjective evaluation of the personal impact, the participation in DDMPES had (or has) on the participating students.

Thereby all of the interviewees evaluate the programme and the academic year abroad, which is associated with it, as one of the most important and personality-shaping experiences and decisions, they made in their lives. The talk will therefore try to explain, what (and who) has made the DDMPES the remarkable and successful academic exchange project, that it is.

DOI: 10.17223/9785946218412/5

MECHANICS OF ADHESIVE CONTACTS: EXPERIMENT AND THEORY

^{1,2}Lyashenko I. A., ¹Popov V. L.

¹*Technische Universität Berlin, Germany*

²*Sumy State University, Ukraine*

Adhesion is both important and intriguing phenomenon in tribology. Despite studying of adhesion since many years, we are still far from complete understanding of this phenomenon. There are several classical theories and mathematical models of adhesion: the JKR theory [1] which is valid in the limiting case of very short range adhesive interactions, DMT theory [2], applicable in the contrary limiting case of long range adhesive interactions, as well as the theory by Maugis [3] considering arbitrary range of interactions, however, using a simplified interaction potential. The JKR and DMT theories are included in the Maugis theory as limiting cases. However, there are many problems, which wait for their solution. Thus, adhesion of rough surfaces is still discussed very controversially; the acceptable theory of adhesion of viscoelastic materials is practically absent. Even more complicated and controversial is adhesion in presence of tangential load, in particular the interrelation between adhesion and friction.

In [4], experimental equipment for investigation of flat-ended indenters during normal motion was designed and described. Authors developed numerical simulation procedure based on the Boundary Element Method (BEM) and used it for simulation of adhesion of complex shaped indenters. They validated the results by comparison with experiments. In the present work, we improved the equipment, described in [4]. The main difference of our experimental setup is the presence of possibility of both normal and tangential motions. Extensive parameter studies with flat and rough surfaces, parabolic and cylindrical indenters, were carried out. One of the effects, which we were concentrated on, was the difference in force-displacement relations on the stages of indentation and detachment. This is very well-known effect, which even have been observed on the nano scale – in AFM experiments [5]. Also, we investigated adhesion properties of flat indenters. Results of experiments are showed in Fig. 1.

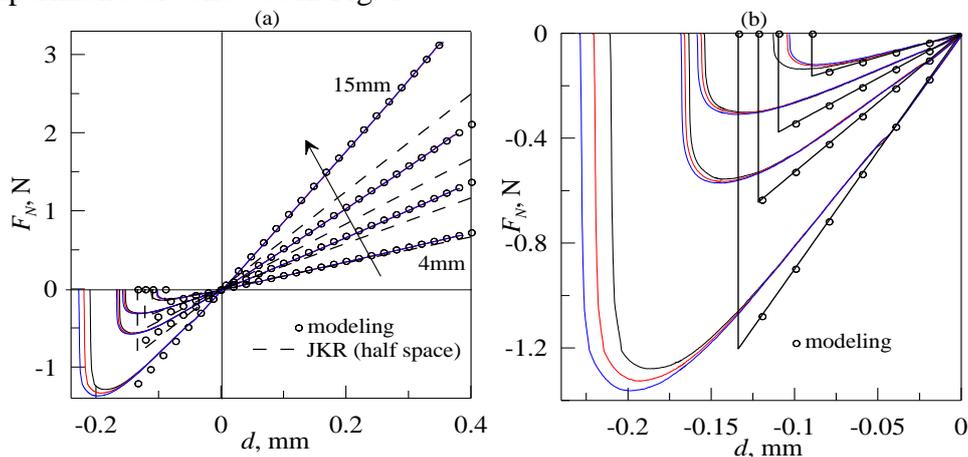


Fig. 1. (a) dependencies of normal force F_N vs. indentation depth d for indentation of steel cylindrical indenters with diameters of 4, 7, 10 and 15 mm in a flat layer of rubber TARNAC CRG N3005 with thickness $h=25$ mm (symbols). Dashed lines – theoretical predictions in the framework of JKR model for half-space approximation. Solid lines – simulation with BEM for layered systems; (b) Part of $F_N(d)$, depicted in fig. 1a, in the area of detachment, without showing of JKR approximation.

In all experiments, cylindrical indenters with different radii were indented in the rubber layer to maximal indentation depth $d = 0.4$ mm. Then indenters were pulled up to the moment of complete detachment. For each indenter, experiments were repeated 3 times, all three results are shown in fig. 1. In the fig. 1a, by dashed lines results, obtained in the framework of JKR theory in the half-space approximation are shown. Figure shows rather good comparison between JKR theory and experiment only in the case of the indenter with diameter 4 mm, because for half-space approximation diameter

of indenter must be much smaller than thickness of the rubber. Solid lines represent the results obtained by BEM adapted for layered systems [6]. For simulation we used experimentally obtained parameters: elastic modulus of the rubber $E = 0.324$ MPa, surface energy $\gamma_{12} = 0.326$ J/m² and Poisson number $\nu = 0.47$. Rubber was located on the glass surface (in our simulations it was undeformed material with infinite value of elastic modulus). In figure, one can see that the simulation results coincide with great accuracy only in the area of positive indentation depth. For adhesion area there is a relatively large difference (see fig. 1b).

Some of experimental details still could not be explained theoretically. First, in simulations we have sharp disappearance of the contact at one single critical displacement, but experimental results show rather slow detachment and several stable configurations of the contact (with area of the contact smaller than the radius of cylinder). Velocity of the indenter motion in the detachment area (fig. 1b) was only 0.1 $\mu\text{m/s}$, at this velocity the viscosity could not be the reason for this discrepancy. We are inclined to think the reason is in a friction force in the boundary line of the contact. This fact must be investigated further, because in all experiments (both with flat and rough surfaces) we have observed the same behavior.

For example, fig. 2 shows results of indentation of spherical indenter in the rubber material as we used for obtaining of results shown in fig. 1.

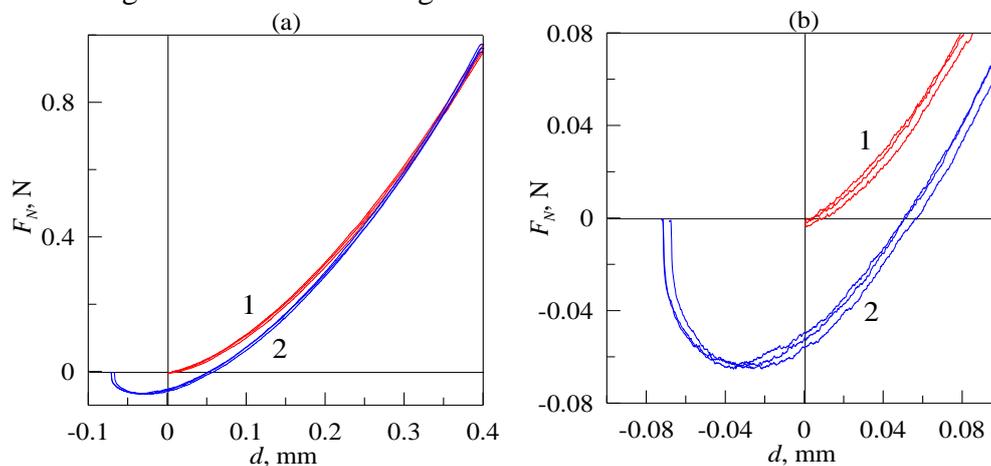


Fig. 2. (a) Dependencies of the normal force F_N vs. indentation depth d for indentation of steel spherical indenter with radii $R=33$ mm in a flat layer of rubber TARNAC CRG N3005 with thickness $h=25$ mm. (b) Enlarged fragment of the figure.

Here we also performed 3 experiments, and we can see good repeatability of results. At the stage of indentation these dependencies (curves 1) started from the point of origin at zero normal force, but during opposite direction normal force goes well below zero, because of adhesion interaction and presence of adhesion neck. We found, that curves 1 at indentation are well described by Herz [7] contact model, without adhesion. For the stage of detachment, much better approximation is JKR model [1, 3].

1. Johnson K. L., Kendall K., Roberts A. D. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids // Proc. Royal Soc. Lond. A, 1971, V. 324. P. 301–313.
2. Derjaguin B. V., Muller V. M., Toporov Yu. P. Effect of Contact Deformations on the Adhesion of Particles // J. Colloid Interface Sci., 1975, V. 53. P. 314–326.
3. Maugis D. Adhesion of Spheres: the JKR-DMT Transition using a Dugdale Model // J. Colloid Interface Sci., 1992, V. 150, P. 243–269.
4. Popov V. L., Pohrt R., Li Q. Strength of Adhesive Contacts: Influence of Contact Geometry and Material Gradients // Friction, 2017, V. 5. P. 308–325.
5. Buzio R, Valbusa U. Interfacial stiffness and adhesion of randomly rough contacts probed by elastomer colloidal AFM probes // Journal of Physics: Condensed Matter, V. 20. P. 354014: 1–9.
6. Li Q., Pohrt R., Lyashenko I. A., Popov V. L. Boundary element method for nonadhesive and adhesive contacts of a coated elastic half-space // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part J: Journal of Engineering Tribology, 2019, <https://doi.org/10.1177/1350650119854250>
7. Hertz H. Über Die Berührung Fester Elastischer Körper // Journal für die reine und angewandte Mathematik, 1882, V. 92. P.156–171.

DOI: 10.17223/9785946218412/6

FORMATION OF HIERARCHICALLY ORGANIZED ALUMINUM HYDROXIDES DURING WATER OXIDATION OF Al NANOPARTICLES AND THEIR INTERACTION WITH BIOOBJECTS

¹Lozhkomoev A.S., ¹Kazantsev S.O., ¹Bakina O.V.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, Russia*

Obtaining new knowledge in the field of interaction of nanostructured materials with biological objects for the development of biomedical materials of directional action is a relevant area of research. One of the objectives of this area is the structure of materials and complex shell structures. In our work, we showed that using AlN/Al nanoparticles obtained by electrical explosion of a wire, it is possible to synthesize nanostructures with different textural characteristics, morphology, and phase composition.

In the results of water oxidation of AlN/Al nanoparticles at 60 °C, agglomerates up to 1 μm in size, consisting of highly crumpled AlOOH nanosheets 2-5 nm thick are formed (fig. 1a). After water oxidation of AlN/Al nanoparticles under hydrothermal conditions (200 °C, 6 atm), boehmite nanoplates with a size of 20-100 nm and a thickness of 5-30 nm are formed (fig. 1b). In humid air, Al nanoparticles oxidize to hexagonal rods of bayerite (fig. 1c).

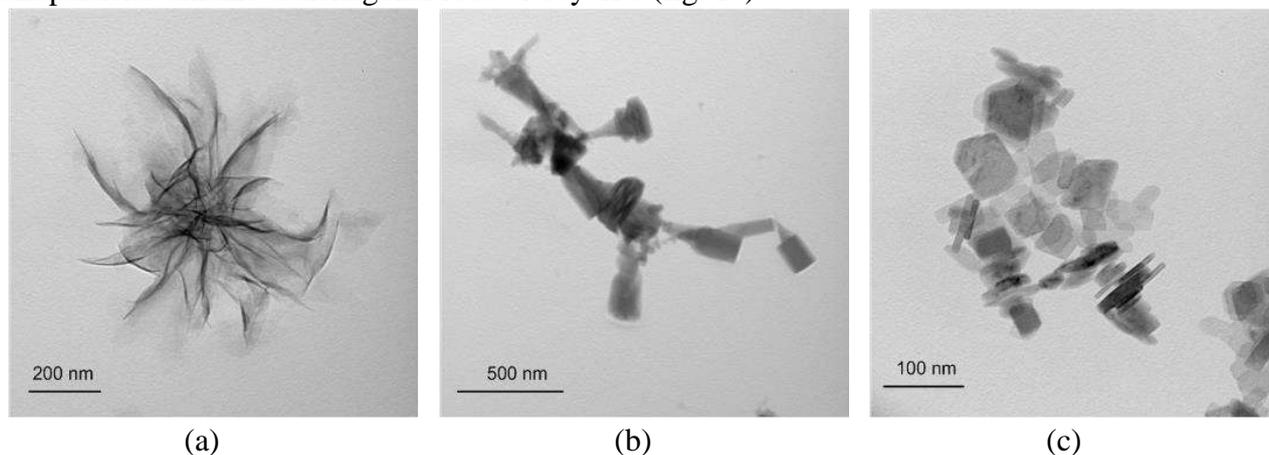


Fig. 1. TEM-images of agglomerates of crumpled AlOOH nanosheets (a), nanoplates of boehmite (b) and hexagonal rods of bayerite (c)

It is shown that the heat treatment of the synthesized nanoplates and hexagonal rods of nanostructures is accompanied not only by phase transitions, but also by a change in textural properties. After calcinations of bayerite nanostructures at 300 °C, the specific surface area increases from 27 m²/g to 303 m²/g. The maximum specific surface area of nanoplates (120 m²/g) is achieved as a result of calcination at 500 °C.

In vitro experiments found that all synthesized nanostructures do not have a cytotoxic effect on normal cell lines. At the same time agglomerates of crumpled nanosheets of AlOOH, unlike boehmite nanoplates and bayerite hexagonal rods, effectively suppress the tumor cells viability.

The present work was performed within the frame of the Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013–2020, line of research III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/7

BIO – INORGANIC INTERFACES: FROM SIMULATIONS TO APPLICATIONS

¹Alexey A. Tsukanov, ¹Sergey G. Psakhie

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, Russia*

The study of interfacial effects and phenomena, occurring in the molecular scale at bio-inorganic interfaces, are important in many practical and scientific fields such as nanomedicine, theranostics, bio-nanotechnology, implantology, environmental and materials sciences. Besides the growth of computational power of supercomputers and the efficiency of parallel technologies, the development of computational methods in the chemistry and materials sciences has allowed the computer simulations to become a powerful tool to study the complicated molecular systems and to predict their behavior or properties at the levels from quantum-mechanical [1] to mesoscale one [2]. The present work is a review of studies conducted by the scientific group of Dr. Sergey G. Psakhie, related to the phenomena on the bio – inorganic (soft matter – hard matter) interfaces at the molecular scale, and the use of molecular dynamics simulations to obtain the quantitative and qualitative characteristics of these systems.

The computer simulations of heterogeneous systems with a bio-inorganic interfaces can improve the understanding of molecular-level mechanisms related to the practically essential problems such as the selective adsorption of biomolecules and the ions of biological medium, the formation and stability of functionalized and hierarchical nanomaterials and coatings, the interaction of nanomaterials with cells and bacteria, including the impact to the plasma membrane integrity and the functioning of proteins. Four types of problems are considered, each of which is important for several practical applications. Some of them are depicted at the scheme (see Fig.1).

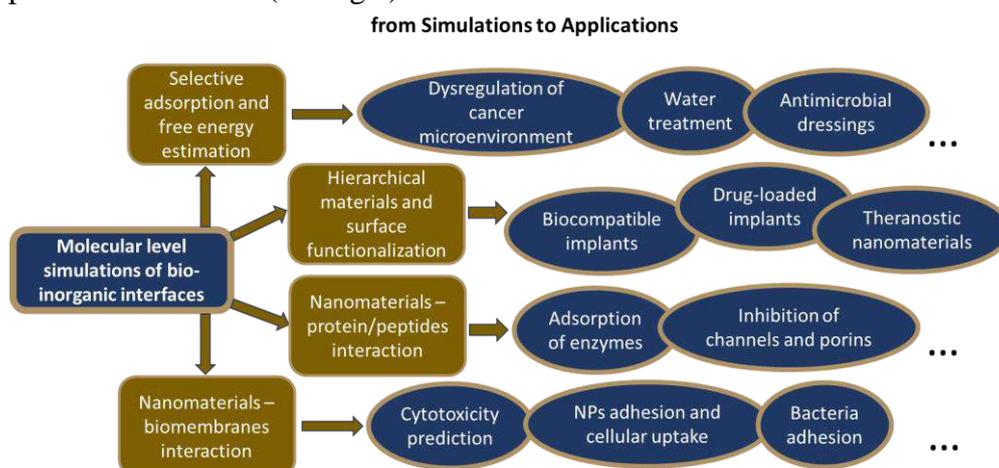


Fig. 1. Molecular-level computer simulations of effects and phenomena, taking place within bio-inorganic interfaces, provide important data for such practical fields as biomedicine, implantology, environmental and materials sciences.

Due to the high specific surface area, amphoteric properties and high surface density of active groups the low-dimensional aluminum (oxy)hydroxide nanostructures are very prospective for the range of biomedical applications [3, 4]. The results of classical unbiased simulations demonstrate that the presence of the alooehene – aluminum oxyhydroxide based nanomaterial – leads to the selective adsorption and redistribution of the bio ions in the proximity of the cell membrane [5]. Such an action of the alooehene causes the tumour microenvironment dysregulation, which allows the alooehene to be the adjuvant and the base for the development an efficient anticancer agent [5].

Investigations of the formation and the stability of bio-inorganic complexes can provide us with the data necessary for the design and development of functional coatings, bio-inorganic composites [6], drug-loaded implants [7] and the hierarchically composed theranostics agents for the medical imaging and targeted drug delivery [8]. Molecular simulations can provide a deep inside into mechanism of intermolecular interaction between subsystems, estimate the free energy as well as assist in choosing of the functional groups with stronger binding energy or inorganic material with certain type of irregularities and defects [9, 10]. For instance, the outcomes of MD simulations shown that the formation of bio-

inorganic multi-molecular complexes of amino acid anions on the surface of Al-Mg layered double hydroxide is possible and is driven by hydrogen bonding and electrostatic attraction [11].

Interactions at bio-inorganic interface between nanomaterial and the fragments of protein may, in principle, disrupt the functioning of this protein. Using the classical and steered molecular dynamics it was shown that the free energy of adsorption of glutamic residues is sufficiently large to bind the entire protein loop, carrying these residues, with the metal hydroxide nanosheet [12]. Such an interaction may cause the deformation of the protein structure, inhibiting its functioning.

We also face the bio-inorganic interface in the problem of the nanomaterials' cytotoxicity assessment. The computer simulations can be used for this problem as well. In particular, MD simulations of nanoparticles interaction with the plasma membrane as well as interaction between the nanomaterial surface and the membrane building units may shed a light on the possible mechanisms of cell membrane disruption [13, 14].

In summary, the present review demonstrates the versatility of the systems with bio-inorganic interfaces at the same time with an opportunity we have of comprehensive studying of such systems at the nanometer scale using the direct computer simulations with a molecular dynamics approach.

1. Dolgonos G., Tsukanov A., Psakhie S. G., Lukin O., Gurbych O., Shivanyuk A. Theoretical studies of capsular complexes of C₂V-symmetrical resorcin[4]arene tetraesters with tetramethylammonium cation. // *Comp. and Theor. Chem.*, 2019. V. 1159. P. 12–17.
2. Psakhie S. G. et al. Movable cellular automata method as a tool for physical mesomechanics of materials. // *Phys. Mesomech.*, 1998. V. 1(1). P. 89–101.
3. Lozhkomoev A. S., et al. On the possibility of soft matter nanostructure formation based on mesoporous aluminum hydroxide. Prospects for biomedical applications. // *Phys. Mesomech.*, 2017. V. 20(2). P. 134–141.
4. Lozhkomoev A. S., Kazantsev S. O., Lerner M. I., Psakhie S. G. Acid-base and adsorption properties of the AlOOH 2D nanostructures as factors for regulating parameters of model biological solutions. // *Nanotech. in Russia*, 2016. V. 11(7-8). P. 506–511.
5. Lerner M. I. et al. Crumpled Aluminum Hydroxide Nanostructures as a Microenvironment Dysregulation Agent for Cancer Treatment. // *Nano Letters*, 2018. V. 18(9). P. 5401–5410.
6. Bernstein M. et al. Low Temperature Fabrication of β -TCP–PCL Nanocomposites for Bone Implants. // *Adv. Engineering Mater.*, 2010. V. 12(8). P. B341–B347.
7. Sharipova A., Swain S. K., Gotman I., Starosvetsky D., Psakhie S. G., ..., Gutmanas E. Y. Mechanical, degradation and drug-release behavior of nano-grained Fe–Ag composites for biomedical applications. // *J. mech. behavior of biomed. mater.*, 2018. V. 86. P. 240–249.
8. Mikhaylov G. et al. Ferri-liposomes as an MRI-visible drug-delivery system for targeting tumours and their microenvironment. // *Nature nanotech.*, 2011. V. 6(9). P. 594.
9. Tsukanov A. A., Psakhie S. G. Adhesion effects within the hard matter–soft matter interface: molecular dynamics. *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering*, 2016. V. 14(3). P. 269–280.
10. Tsukanov A. A., Psakhie S. G. From the soft matter-hard matter interface to bio-self-organization and hybrid systems. // *Phys. Mesomech.*, 2017. V. 20(1). P. 43–54.
11. Tsukanov A., Psakhie S. G. Energy and structure of bonds in the interaction of organic anions with layered double hydroxide nanosheets: A molecular dynamics study. *Sci. rep.*, 2016. V. 6. P. 19986.
12. Tsukanov A. A., Psakhie S. G. Adsorption of charged protein residues on an inorganic nanosheet: Computer simulation of LDH interaction with ion channel. // *AIP Conference Proceedings*, 2016. V. 1760(1). P. 020066.
13. Tsukanov A. A., Psakhie S. G. Two-dimensional Al hydroxide interaction with cancerous cell membrane building units: Complexed free energy and orientation analysis. // *AIP Conference Proceedings*, 2017. V. 1882(1). P. 020076.
14. Tsukanov A., Psakhie S. G. Potential of mean force analysis of short boron nitride and carbon nanotubes insertion into cell membranes. // *Adv. Biomater. and Dev. in Med.*, 2016. V. 3(1). P. 1–9.

DOI: 10.17223/9785946218412/8

DIFFERENT FAULT SLIP MODES - GOVERNING, EVOLUTION AND TRANSFORMATION

Kocharyan G.G., Ostapchuk A.A., Pavlov D.V.

Institute of Geosphere Dynamics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

The work presents a brief summary of fundamental results obtained in IDG RAS in investigating the mechanics of sliding along faults and fractures. Some of these results had been obtained in teamworks and discussions with the group of scientists and specialists headed by S.G.Psakhie.

The methodological base of activities in this direction was to divide the problem into the structural and mechanical constituents, and the main task was to elaborate a phenomenological model of the phenomenon [1].

The structural constituent was constructed on the base of in situ investigations of regularities of localizing slip events in space and time, and geological and tectonic conditions of their emergence. The results of geological description of exhumed fault segments, the data on deep drilling in fault zones, the detailed investigations of locations of seismic sources, spotted with high accuracy, all these results assert an extremely high degree of localization of coseismic displacements.

Conditions of emergence and evolution of different fault deformation modes testify probable macro-structural differences of fault segments, at which different slip modes do realize. The degree of localization of surface manifestations is noticeably higher in the segments of the Earth's crust where "normal" earthquakes occur. Fault splitting, expansion of zones of dynamic influence, maximal values of the fractal dimension of crack system are specific for the zones of slow slip events.

At the meso-scale the highest sliding velocities in releasing the excessive stresses correspond to the minimal fractal dimension, that is to fillers with maximal order. The sliding mode strongly depends on the matter and granular composition of the geomaterial in the sliding zone, the shape of granules, their electrochemical interaction, presence of fluid and its properties. Occurrence of even thin films of fluid at the grain surfaces leads to increasing probability of realizing the "stick-slip" mode and an increase of the stress drop under constant static strength. At high deformation rates the fluid penetrates into the contact zone between filler grains and stabilizes sliding. The higher the viscosity of the fluid is, the lower is the deformation rate at which sliding stabilizes.

Laboratory, numerical and field experiments constituted the base of the mechanical part of the model. All possible sliding modes were realized in laboratory, from creep to dynamic failure. Experiments on triggering the contact zone (injecting water or a surface-active agent, vibrating the interblock contact, acting by electrical pulses) have demonstrated that even a weak external disturbance can trigger a "prepared" contact [2], however, in order to change the slip mode and decrease the cumulative value of radiated seismic energy, a change of the matter composition of the sliding zone is needed, for example, by injecting fluid with special properties. The aim should be not to lower the excessive stress, as it was thought previously, but to decrease the shear stiffness of the fault zone.

It was experimentally proven that small variations of the percentage of materials exhibiting properties of velocity strengthening and velocity weakening in the fault principal slip zone may result in significant variation of the share of seismic energy radiated during a fault slip event [3]. Tests simulated different modes of interblock sliding, scaled kinetic energy of those modes varied by several orders of magnitude, while differences in contact strength and shear stress drop remained relatively small. The obtained results led to the conclusion that the earthquake radiation efficiency and the fault slip mode are governed by the ratio of two parameters — maximum fault slip-weakening rate and shear stiffness of the enclosing massif.

Briefly, the main points of the phenomenological model are as follows:

- Movements along faults make a continuum of slip modes – from earthquakes to slow slip events and steady creep;
- Irrespective of P-T conditions, tectonics, material composition of a fault, watering, pore pressure, etc., the regularities of origination, development and transformation of slip modes on a fault are controlled by the ratio between the shear stiffness of the fault and the one of the surrounding rock mass;

• The most probable mechanism that controls in broad limits the portion of energy radiated in a slippage on a fault, is the drastic decrease of the shear stiffness of a certain fault section as a result of a different, in comparison to other sections or other faults, material composition of the principal slip zone, a sub-lithostatic level of pore pressure, and some other mechanical, geological and geochemical processes. The mentioned characteristics can alter gradually in time and space. The laws of changing stiffness with scale are defined by several hierarchical levels, inside which changing parameters of earthquakes with scale obey to different laws;

• Slip along a fault is a heterogeneous process. The values of radiated energy and released seismic moment change during rupture propagation. This heterogeneity is produced, alongside with other reasons, by different values of the shear stiffness at different fault sections. The seismogenic rupture always nucleates at a fault section with unstable friction and high stiffness, which rapidly decreases just before the rupture starts. This decrease of stiffness may manifest in the spectrum of low-frequency ambient noise. Stable or conditionally stable fault segments can be the sections that brake or event stop the rupture.

The ideas developed were applied to determine a principal possibility to artificially transform the deformation regime of a section of a small fault into a slow deformation mode with low share of seismic wave radiation, for example, to provide safe mining. Judging by the obtained results, the magnitude of earthquakes sensitive to anthropogenic effects is limited and according to expert judgment can hardly exceed the value of $M \sim 6-6.5$.

1. Kocharyan G.G. Geomechanics of Faults. Moscow, GEOS publishers, 2016, 424p. (in Russian).
2. Kocharyan G.G., Ostapchuk A.A., Pavlov D.V., Markov V.K. The Effects of Weak Dynamic Pulses on the Slip Dynamics of a Laboratory Fault // Bulletin of the Seismological Society of America. 2018. V.108 (5B). P. 2983–2992.
3. Kocharyan G.G., Novikov V.A., Ostapchuk A.A., Pavlov D.V. A study of different fault slip modes governed by the gouge material composition in laboratory experiments // Geophysical Journal International. 2017. V. 208. P. 521–528.

DOI: 10.17223/9785946218412/9

COMPUTER SIMULATION OF THE SYNTHESIS OF COMPOSITE MATERIALS OF MEDICAL APPLICATION WITH THE REQUIRED STRUCTURAL AND MECHANICAL CHARACTERISTICS

Tovpinets A.O., Leitsin V.N., Dmitrieva M.A.

Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, Russia

The presented researches are devoted to the development of the basis for the synthesis of a promising class of biodegradable, bioactive materials with a given complex of structural and mechanical properties. The researches serve as a basis for creating modern biocomposites for personalized replacement of bone tissue defects. The relevance of the researches caused by the needs of regenerative surgery in multivariate compositions of bioresorbable materials that imitates the structural and functional state of the regenerating tissue and allows varying the actual composition depending on the characteristics of the patients. The results of investigation are focused on the introduction of modern digital techniques in the practice of personalized regenerative medicine.

Due to this investigation, a computer modeling approach has been developed. This approach allows to obtain technological conditions (modes) for the synthesis of composite materials for medical purposes with the required structural and mechanical characteristics. A complex physical and mathematical model of the synthesis of the structure of a low-temperature multicomponent nano-modified composite material is based on the model of mechanochemical processes in reacting powder mixtures [1] and the computer modeling approach that built for LTCC synthesis [2]. All the characteristics of the medium are considered as effective with taking into account local concentrations and state parameters in every microvolumes of the model body which formed in the process of discretization of the computational domain. These characteristics are refined iteratively at each time point. The representative volume of the original compact includes representative parts of individual layers and interlayer interfaces. The model structure of the original compact is represented by a periodic system of such selected volumes. One-dimensional distributions over the thickness of the layer of volumetric concentrations of components (refractory, low-melting components and pores) are investigated for the considered model porous powder body. The developed approach allows to take into account the scatter of volume concentrations of dispersed components and pores, the possibility of convective heat and mass transfer, phase transitions of components, polydispersity of components (the presence in the mixture of component fractions of particles of various sizes), the anisotropy of shrinkage and effective characteristics of the synthesized material, residual stresses in the matrix of a multicomponent low-temperature material after the synthesis, the possibility of forming the inner frame of the interacting particles of refractory components, and other factors and behaviors of multicomponent composite materials.

The developed approach provides the carrying out multifactor multiparameter computational experiments to optimize the composition and structure of the original multicomponent dispersion for the synthesis of a bioresorbable nano-modified multicomponent low-temperature material with the required structural and mechanical characteristics.

The results of the research will serve as the basis for ensuring the development of technological regimes for the synthesis of a new class of bioresorbable nano-modified multicomponent materials for the replacement of bone tissue defects.

1. Vladimir N. Leitsin, Maria A. Dmitrieva, Tatiana V. Kolmakova Governing Factors of Physical and Chemical Behavior of Reactive Powder Materials // Powder Metallurgy Research Trends / Editors Lotte J. Smit and Julia H. VanDijk. Nova Science Publishers, Inc. NY, 2008.

2. Leitsin V.N., Dmitrieva M.A., Ivonin I.V., Ponomarev S.V., Polyushko V.A., Tovpinets A.O., Narikovich A.S. Determining Factors in the Formation of Low-Temperature Ceramics Structure // Physical Mesomechanics. 2018. Vol. 21 (6). P. 529-537.

DOI: 10.17223/9785946218412/10

MULTISCALE MODELING THE MECHANICAL BEHAVIOR OF BIOINERT Ti-Nb ALLOYS

¹Skripnyak N.V., ¹Skripnyak E.G., ¹Skripnyak V.A.
¹*National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia*

The aim of the work was to develop a multi-scale computational model for predicting the mechanical properties of bioinert ultrafine-grained (UFG) Ti-Nb alloys with high specific strength, lower elastic moduli to replace full-scale experimental studies with computer simulation of promising and developed alloys with regard to structure at different scale levels.

The predictions of the mechanical properties of Ti-Nb alloys were obtained using the results of simulation the response of model volumes of single-phase and multi-phase media to external thermomechanical effects. Model volumes of Ti-Nb alloys were created taking into account the data on the distribution of phases obtained as a result of microstructural studies of experimental samples of the alloys. It was taken into account that the volume concentrations of alpha, alpha'' and beta phases in the structure of Ti-Nb depend on the concentration of Nb and the heat treatment regimes. The plastic flow of alpha and beta phases was described using variants of microdynamic constitutive equations for metals with a face-centered cubic lattice (for the alpha phase) and a body-centered lattice (for the beta phase). It was shown that UFG Ti-Nb alloys exhibit higher values of the yield strength, but significantly lower values of strain hardening as compared to coarse grained alloys.

The effective shear stresses are calculated by the algebraic sum of the stresses from the external load and the components of the back stresses. The components of internal back stresses are calculated by the sum of the components depending on the accumulated density of dislocations, the Orowan stresses arising around the nano-size inclusions, as well as the stress components caused by the twins substructure and grain boundaries.

The increment of plastic strain caused by a twinning in Ti-Nb alloys is determined by a semi-phenomenological equation. This equation relates the increment of shear plastic deformation with the increment of the volume concentration of twins and the displacement of the crystal lattice during twinning:

We simulated the response of the model volume of single-phase and multi-phase media to external thermomechanical effects for prediction of Ti-Nb mechanical behavior. The simulation of the effects of pulses on the boundary of the model volume made it possible to calculate the propagation velocity of elastic waves and determine the effective elastic moduli for multiphase alloys without invoking additional hypotheses about the effect of the structure on the elastic properties of Ti-Nb alloys.

The anisotropy effect of the elastic properties of the grains can be neglected due to the small effect on the average stress components in the representative volume of ultrafine-grained alloys or alloys with a bimodal grain size distribution compared to the anisotropy effects resulting from plastic deformation.

The developed multilevel model allows using the results of modeling the propagation of stress waves in model volumes of alloys to predict the magnitude of the elastic moduli of Ti-Nb alloys taking into account the phase composition of the alloys and the grain size distribution.

It was shown that the dependence of the Young's modulus of Ti-Nb alloys on the concentration of Nb in the range from 1 % to 45 % by weight is non-monotonic. Stress-strain curves of Ti-Nb alloys under tension were obtained by computer simulation. Model volumes of coarse-grained and ultrafine-grained Ti-Nb alloys with Nb concentrations of 1%, 13% and 45% were simulated at strain rate of 0.01 s^{-1} at 295 K. Calculated stress-strain curves are shown in Fig.1. The Ti – 13Nb-13Zr alloy consisted of grains of a solid Nb solution in the alpha phase of Ti, a solid solution of Nb in the beta phase of Ti, and particles of Nb in the beta phase.

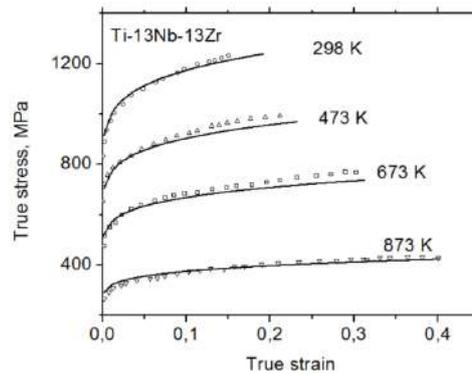


Fig. 1. Calculated stress-strain curves of coarse-grained Ti – 13Nb-13Zr alloy under tension. Symbols are experimental data [1]

Stress-strain curves of coarse-grained (1) and ultrafine-grained (2) Ti – 45Nb alloy under tension are shown in Fig.2.

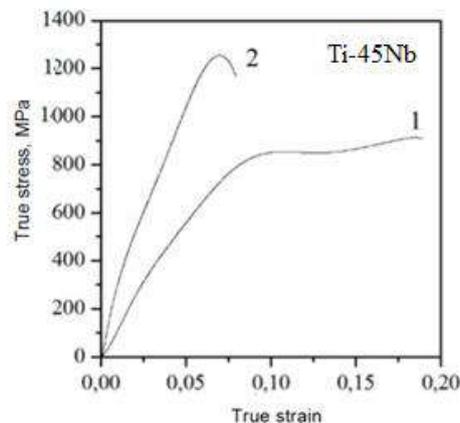


Fig. 2. Stress-strain curves of coarse-grained (1) and ultrafine-grained (2) Ti – 45Nb alloy under tension [2]

It was shown that Ti-Nb alloys with ultrafine-grained structure exhibit higher values of yield strength, but significantly lower values of strain hardening as compared to alloys in the large-crystalline state. Mechanical response of model volumes of Ti-Nb alloys was simulated in the range of temperature variation from 295 K to 873 K, taking into account changes in thermally activated dislocation mechanisms of plastic deformation and twinning [3]. It was shown that an increase in temperature in the specified range leads to a decrease in the yield strength and flow stress of the Ti-13% Nb alloy by three times.

1. Bobbili R., Madhu V. Constitutive Modeling and Fracture Behavior of a Biomedical Ti–13Nb-13Zr Alloy // *Materials Science and Engineering A*. 2017. V. 700. P. 82-91.
2. Sharkeev Yu., Vavilov V., Skripnyak V. A., Belyavskaya O., Legostaeva E., Kozulin A., Chulkov A., Sorokoletov A., Vladimir V. Skripnyak 3, Anna Eroshenko 1 and Marina Kuimova Analyzing the Deformation and Fracture of Bioinert Titanium, Zirconium and Niobium Alloys in Different Structural States by the Use of Infrared Thermography // *Metals* 2018. V. 8. 703. 15p.
3. Skripnyak V.A., Skripnyak V.V., Skripnyak E.G., Skripnyak N.V. Modelling of the Mechanical Response of Zr-Nb and Ti-Nb Alloys in a wide Temperature Range // *Proceedings of the 6th International Conference on Integrity-Reliability-Failure (Lisbon/Portugal, 22-26 July 2018)* P. 855-862.

DOI: 10.17223/9785946218412/11

ELECTRON BEAM ADDITIVE MANUFACTURING OF METAL PRODUCTS AS A PROCESS OF NONSTATIONARY METALLURGY: MATERIALS AND FEATURES

¹Kalashnikov K.N., ¹Kolubaev E.A.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, Russia*

Additive manufacturing (AM) is a technology that allows the formation of various products by gradually adding thin layers of materials [1]. This approach to product formation allows to produce complex or non-standard parts of the required shape and size without the need for expensive tools for machining and reduces the need for many traditional processing steps. This also reduces material costs, which is extremely cost-effective. For these reasons, AM is now a new paradigm for the development and manufacture of products for the aerospace, medical and other industries. For example, it is possible to produce fuel injectors or balloons for aerospace equipment that previously required multiple component assemblies, as well as lightweight engineering structures that result in significant cost savings. Medical and dental implants manufactured by the means of AM offer significant improvements in biocompatibility and integration of implants into patients [2].

Additive metal manufacturing processes are divided into two categories as defined by ASTM F2792: Directed Energy Deposition and Powder Bed Fusion. Further differentiation is provided depending on the primary heat source, such as laser, electron beam, plasma arc and gas-metal arc sources [1]. The process of electron-beam wire-feed additive manufacturing is the least studied of the above, however, is the most interesting in terms of nonstationary metallurgy due to specific production conditions. The range of materials used in additive manufacturing is very wide and includes structural steels, titanium alloys, nickel alloys, aluminum alloys and others. To study the features of the electron-beam additive manufacturing process, studies of steel 321 and titanium alloy Ti-6Al-4V samples obtained by this method were carried out.

One of the main features of non-stationary metallurgy is directional solidification. This is manifested in the ability of the material to crystallize in the direction of the temperature gradient. In most cases, due to the very rapid cooling and heat removal through the substrate, the main direction of growth of the dendrites in the steel 321 coincides with the direction of the product formation. In the case of titanium alloy, temperature gradient determines the growth direction of the primary β -phase grains. At the same time, the α - or α' -phase is also determined by the process temperature and the cooling rate. Another feature of the studied process is the ability to produce products with mechanical characteristics comparable to cast materials. Thus, steel 321, obtained by the method of non-stationary metallurgy, has a tensile strength equal to 536 MPa, while the literary value corresponds to the range from 510 to 650 MPa. A similar result is observed for the titanium alloy: 896 MPa, with a literary value of 900 to 1200 MPa. It is also worth highlighting the anisotropy of material properties caused by thermal history. For example, the microhardness of titanium alloy samples in the lower and upper parts of the sample differs by 10-15%. Primarily, this is due to a different structural-phase state in these areas and the ratio of the phases α and α' .

Consequently, the main way to control the crystallization process and the properties of the resulting products is to control the temperature conditions, which are determined by the printing mode and cooling rate.

This work was performed within the frame of the Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013-2020, line of research III.23.

1. DebRoy T., Wei H.L., Zuback J.S., Mukherjee T., Elmer J.W., Milewski J.O., Beese A.M., Wilson-Heid A., De A., Zhang W. (2018) Additive manufacturing of metallic components – Process, structure and properties // *Prog Mater Sci*, 2018. 92. P. 112–224.

2. Chhaya M., Poh P., Rosado balmayor E., van Griensven M., Schantz J.-T., Hutmacher D. Additive manufacturing in biomedical sciences and the need for definitions and norms // *Expert review of medical devices*, 2017. 12. P. 1–7.

DOI: 10.17223/9785946218412/12

**STRUCTURE FORMATION DURING ADHESIVE INTERACTION UNDER FRICTION
STIR WELDING CONDITIONS**

¹Kolubaev E.A., ¹Kalashnikova T.A.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, Russia*

At the present time, thermally wrought Al-Mg alloys with high strength characteristics are used to create the parts for space applications. The Al-Mg-Sc-Zr alloy is the most advanced representative of this family of materials. The yield strength of Al-Mg-Sc-Zr alloy is 1.5 times higher than its analogues. As a result, the wall thickness, and the weight of the structure can be reduced by 20 %, as all aircraft structures operate in the field of elastic deformation. However, this alloy does not weld by traditional welding methods. In this paper, the friction stir welding (FSW) method was studied, which involves the one pass joint of large thicknesses plates. To create a quality weld, it is necessary to reveal the regularities of structure formation at the FSW of large thicknesses plates, which will help technologists in the selection of modes.

In this work, the structure formed in the FSW process was studied on bimetallic joints and Al-Mg-Sc-Zr alloy joints with a thickness of 30 mm and 35 mm.

In the model experiment, showing the formation of a layered structure during FSW, the Al-Mg alloy and copper were used. Fulfill a function of the marker, copper was distributed over the stir zone in the form of a layered structure known as "onion rings". This structure shows that friction stir welding is conducted by the layers formation and material transfer.

In the study of the plastic flow of the material in the area from the tool outlet, it was found that the microstructure at different levels of the horizontal sections of the Al-Mg-Sc-Zr alloy sample thickness is the same. This indicates that the layer-by-layer transfer mechanism is macroscopic. As a result of the conducted research of FSW joints of Al-Mg-Sc-Zr alloy of large thicknesses it was revealed that the structure of the stir zone is a dynamically and initially recrystallized area. A similar structure is observed in sliding friction, and the area, where the material experiences less deformation and lower temperature, is similar to thermomechanical affected zone in friction stir welding. The similarity of the structure testifies to the similarity of the mechanisms occurring in these processes. In the previous studies on the regularities of the transfer layers formation as a result of the adhesion contact of the pair "aluminum alloy - steel" in the sliding friction, it was found that between the aluminum alloy and the steel ball there is a direct and reverse metal transfer [1, 2]. A similar mechanism of material transfer occurs in friction stir welding as well. It is assumed that the aluminum alloy, strongly deformed due to the conditions of comprehensive compression, normal and tangential loading, begins to form adhesive bonds with a steel tool. Due to this interaction, the welding tool grips a layer of a certain thickness and moves it convectively to the area behind the tool. This process of transfer is repeated layer-by-layer with the successive periodic transfer of material by means of adhesive interaction. Thus, a pronounced layered (onion) structure is formed in the stir zone of the welded joint.

This work was performed within the frame of the Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013-2020, line of research III.23.

1. Tarasov S. Yu. Adhesion transfer in sliding a steel ball against an aluminum alloy / S. Yu. Tarasov, A. V. Filippov, E. A. Kolubaev, T. A. Kalashnikova // *Tribology International*. 2017. V. 115. P. 191–198.
2. Tarasov S. Y. A proposed diffusion-controlled wear mechanism of alloy steel friction stir welding (FSW) tools used on an aluminum alloy / S. Y. Tarasov, V. E. Rubtsov, E. A. Kolubaev // *Wear*. 2014. V. 318. P. 130-134.

DOI: 10.17223/9785946218412/13

**ON NONLINEAR DYNAMICS OF BIOLOGICAL SYSTEMS
IN THE PRESENCE OF MICROGRAVITY**

Naimark O.B.

Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russia

Cells in microgravity undergo dramatic changes in their dynamics and morphology, leading to two alternative phenotypes. This spontaneous transition from one to two contemporary present phenotypes is enacted by the mere changes in the gravitational field. The behavior of complex living systems is largely determined by their nonequilibrium dynamics and may be accompanied by qualitative changes in the "plasticity" occurring in the force field. The latter are similar to consistent changes corresponding to epithelial-mesenchymal transitions (EMT) in living cells. Mechanobiological aspects of cell behavior as out-of-equilibrium critical systems were studied using in-situ laser microscopy data and are the basis for the microgravity effect analysis with application to the changing cell phenotypes. Different human cell lines (epithelial cells, osteoblasts, cancer cells) show significant changes in their morphology, both in the real and in laboratory conditions that mimic microgravity. It is noted that 24 hours after exposure to microgravity, the homogeneity of the cell shape is disturbed and two morphological phenotypes appear corresponding to quantitatively different morphological parameters and genetic expression dynamics.

The existence of two populations cannot be considered as a transitional effect: the cells remain viable and continue to proliferate, while the other part of the two morphological classes remains unchanged for a rather long period (more than 7 days) under microgravity conditions. It is also fundamentally important that both phenotypes restore their original morphology within 6-24 hours when returning to the normal gravitational state. The impact of microgravity destabilizes the gene expression in relation to the traditional gravitational "dynamic scenario", which leads to a sharp increase in the variability of gene expression in the vicinity of some "critical states". In contrast, in cells exposed to hypergravity (3 g), no significant changes in the structure of gene expression were observed.

Nonlinear dynamics in the absence of gravitational constraints allows spontaneous appearance of various phenotypes, previously "sorted" by the presence of a "gravitational" attractor (stochastic gene activity). It was established that the "decision" of a cell on the direction of evolution is realized as a result of a monotonous change in the value of a certain bifurcation parameter, which controls the change in the epigenetic landscape providing the specific "attractors" through bifurcations. Such scenarios are noted in experimental studies when the system approaches symmetry breaking in a normal gravitational field.

The influence of microgravity on the mechanisms that initiate the change of cell phenotypes under the conditions of the "bifurcation dynamics" of the mechanobiological state is the basis for considering these processes in the context of the general EMT patterns taking into account the defect (open complex) induced cytoskeleton reorganization. Mechanobiological approaches based on a multiscale analysis of the dynamics of "open complexes" using data from laser microscopy of living cells were developed. This made it possible to substantiate the method of differential diagnosis, reflecting the epigenetic and morphological features of the behavior of cellular structures. The basis of the approach is the quantitative determination of space-time invariants (scaling exponents) characterizing the multiscale dynamics of open complexes with changing phenotypes caused by critical damage (open complex) dynamics.

Comparison of laser microscopy and fluorescent analysis data, implemented simultaneously "in-situ" on some cellular structures, will allow to establish a connection between the critical "kinematic" modes of cell dynamics caused by the collective dynamics of open complexes with the collective dynamics of expression, which also reveals signs of critical dynamics in the behavior of cells. It is advisable to conduct laboratory studies using a clinostat (Random Positioning Machine) with the subsequent application of methods for calculating space-time invariants according to laser microscopy and fluorescence analysis, aimed at determining the quantitative characteristics of each of the co-existing phenotypes with subsequent verification of the results based on received on the orbital station.

Research was supported by the project n. 075-02-2018-147 of the Federal Target Program of the Ministry of Science and Education of the Russian Federation.

DOI: 10.17223/9785946218412/14

**MODELING STATIC THERMOGRAPHY OF CANCER BREAST BY USING
NONDIMENSIONAL STEADY-STATE PENNES EQUATION**

¹Rogotnev A.A., ²Nikitiuk A.S., ²Naimark O.B.

¹Perm Federal Research Center, UB RAS, Perm, Russia

²Institute of Continuous Media Mechanics, UB RAS, Perm, Russia

Breast cancer is the most commonly diagnosed type of cancer in the world and cure rate depend on stage of diagnosis. In cancer detection in early stages, infrared thermography plays an important role. It is known that temperature deviations from normal state in the human body often use as an indicator of illness and progression of a disease. For example, a typical thermogram of tumor breast reveals temperature elevation at the periphery of the tumor [1, 2]. Breasts infrared image of woman, who has the tumor, is shown in figure 1.

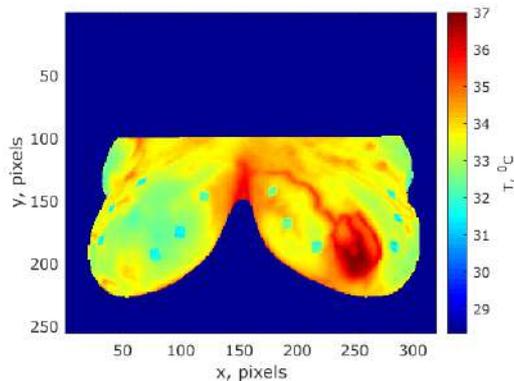


Fig. 1. Breasts infrared image of woman, who is 63 and has cancer

In this work we design a mathematical model of tumor breast infrared thermography in order to describe a temperature distribution on breast surface. Purpose of this work is finding qualitative difference between cancerous and normal tissues of breast.

In order to get the temperature distribution the bioheat Pennes equation and boundary conditions are used [3]:

$$-\nabla \cdot (k \nabla T) = w_b c_b (T_a - T) + q_m, \quad (1)$$

$$T|_0 = T_a, \quad (2)$$

$$-k \nabla T|_r = h(T|_r - T_\infty), \quad (3)$$

where k is thermal conductivity of tissue, T is tissue temperature, q_m is metabolic heat generation rate, w_b is blood perfusion rate, c_b is blood heat capacity, T_a is arterial blood temperature, h is heat transfer coefficient between breast surface and air, T_∞ denotes ambient temperature [3].

The steady-state Pennes equation (1) and boundary conditions (2), (3) are led to the dimensionless form to follow the Frank-Kamenetsky representation in the burning theory [4]. Two dimensionless parameters for equation (1) and one parameter for boundary condition (3) were introduced in order to analyse qualitative differences between cancerous and normal tissue. For example, dimensionless parameter $\beta = (w_b c_b r^2)/k$, where r denotes a size of breast, has higher value for cancer tissue.

The work was financially supported by the Russian Federation via the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project identifier RFMEFI60718X0202).

1. Gonzalez F.J. Thermal Simulation of Breast Tumors. // Revista Mexicana de Fisica, 2007. V 53. No 4. P. 323–326.
2. Saniei E et al., Parameter estimation of breast tumour using dynamic neural network from thermal pattern. // Journal of Advanced Research, 2016
3. Jiang L. et al. Modeling static and dynamic thermography of the human breast under elastic deformation // Physics in Medicine and Biology, 2011. V. 56. P. 187–202.
4. Frank-Kameneckiy D.A. Diffuzija i teploperedacha v himicheskoj kinetike [Diffusion and heat transfer at chemical kinetics]. Moscow. Nauka. 1987. 502 p.

DOI: 10.17223/9785946218412/15

**MULTILAYER MODELLING OF LUBRICATED CONTACTS - A NEW APPROACH
BASED ON A POTENTIAL FIELD DESCRIPTION**

¹Scholle M., ²Gaskell P.H., ^{1,2}Märner F.

¹Heilbronn University, Germany

²Durham University, UK

A first integral approach [1,2], derived in an analogous fashion to Maxwell's use of potential fields [3], is applied for the investigation and minimisation of friction in fluid flow between parallel plates as a model for a lubricated joint, whether naturally occurring or engineered replacements. An idealised system of two-dimensional steady Couette flow is considered as the physical model as shown in Fig. 1: the upper plate translates with speed U while the lower, corrugated, one remains stationary. The region separating the plates is taken to be filled with one or more contiguously contacting, immiscible liquid layers having different dynamic viscosity η ; the case illustrated is for a two-layer system, mimicking the more general case of a joint in which the synovia meets a protective layer exhibiting viscoelastic properties. In the work reported here the associated results are restricted to the simpler case of two Newtonian liquids.

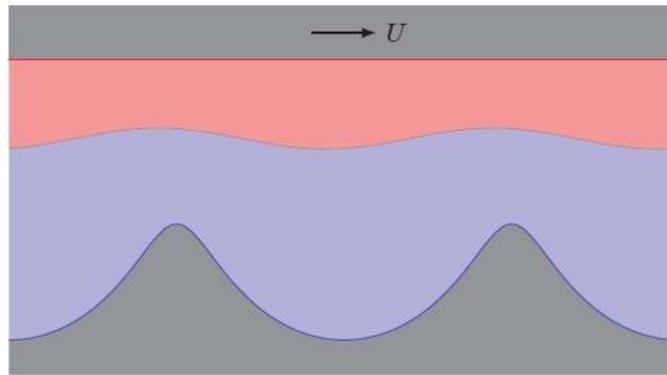


Fig. 1. Schematic of the shear-driven flow generated between two plates, one flat and moving steadily the other stationary, separated by two immiscible liquid layers.

A mathematical model of the resulting steady flow is formulated in terms of a scalar potential Φ , an auxiliary unknown, allowing integration of the governing equations of motion, leading to the following two field equations [2]:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + 2\eta \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} = \frac{\rho}{2}(u^2 - v^2), \quad \eta \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - \eta \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} = \rho uv. \quad (1)$$

These are supplemented by the usual accompanying boundary conditions: no-slip/no-penetration conditions for the velocities u and v at the lower and the upper plate together with periodic boundary conditions at inflow and outflow region to the left and right, respectively. For a two-layer system, additional jump conditions have to be satisfied at the sharp interface $y = f(x)$, between the two, namely:

$$\left[\left[\frac{\partial \Phi}{\partial x} \right] \right] + \frac{\sigma f'(x)}{2\sqrt{1 + f'(x)^2}} = 0, \quad \left[\left[\frac{\partial \Phi}{\partial y} \right] \right] - \frac{\sigma}{2\sqrt{1 + f'(x)^2}} = 0, \quad (2)$$

where σ is the interfacial tension and the double square brackets denote the discontinuity of the associated term. The flow is explored by varying the geometric parameters of the lower contoured plate by considering three models of increasing complexity: a lubrication approximation, Stokes flow and solution of the full Navier-Stokes equations (in first integral form). The latter enables Reynolds number effects to be investigated and, more generally, the validity of the two simpler models to be assessed. In terms of the adopted first integral approach, the standard mathematical form of the jump conditions (2) are advantageous, as is the fact that the resulting friction coefficient can be calculated conveniently from the auxiliary potential field Φ based on the first integral FE formulation used without the need to

approximate velocity derivatives in a post-processing step as would be case if a primitive variable formulation had been adopted.

In the case of a single fluid system, the degenerate case of the two-layer model when both layers have the same properties, is that one possible way to reduce hydrodynamic friction in a system consisting of lubricant liquid confined between two rigid surfaces translating relative to each other is surface contouring allowing for the controlled generation of eddies which act like hydrodynamic roller bearing [3]. In order to illustrate this, the impact of sinusoidal contouring of the lower plate on the friction developed is shown in Fig. 2.

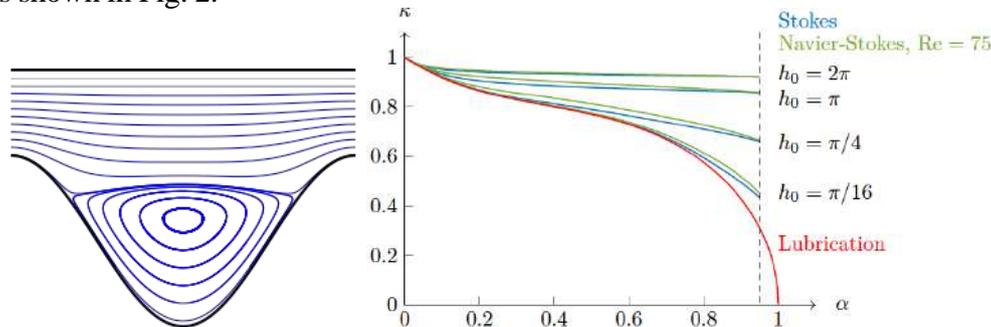


Fig. 2. Single-layer system: geometrically induced eddy (left); resulting friction coefficient κ relative to the same for Couette flow between two flat plates (right). The flow is from left to right and α represents the ratio of the corrugation amplitude to the mean plate separation.

It is found that the lubrication approximation underestimates the friction significantly for large mean plate separation, h_0 , while, for $Re < 100$, the Stokes solution produces a good approximation.

Given that the minimum gap, the distance between the upper moving flat plate and the peak value of the lower corrugated one, is a technical constraint, a comparison of different surface contours – resulting in the same fluid volume between the plates, which is ensured by variation of the amplitude – can be used to reveal a theoretical optimum for a particular castellated shape.

For the case of two layers it will be shown how the friction coefficient is influenced by the mean thickness of the two layers and the respective densities and viscosities of the individual liquid layers. This will include basic considerations about the stability of the flow. Perspectives will be provided as to how the method may be extended and applied to the more challenging case of employing viscoelastic liquids.

1. Scholle M., Haas A., Gaskell P. H. A first integral of Navier-Stokes equations and its applications. RSPA, 2011. V. 467. PP. 127–143.
2. Marner F., Gaskell P. H., Scholle M. On a potential-velocity formulation of Navier-Stokes equations. Physical Mesomechanics, 2014. V. 17(4). PP. 341–348.
3. Marner F. Potential-Based Formulations of the Navier-Stokes Equations and Their Application. Ph.D. Thesis, Durham University, Durham, UK, 2019.

DOI: 10.17223/9785946218412/16

DIFFERENTIATION OF BREAST NORMAL AND CANCER CELLS BY LASER INTERFERENCE MICROSCOPY

¹Nikitiuk A.S., ²Voronina A.O., ²Beloglazova Yu.A., ²Khmurchik M.V.,
²Grishko V.V., ¹Naimark O.B.

¹*Institute of Continuous Media Mechanics, UB RAS, Perm, Russia*

²*Institute of Technical Chemistry, UB RAS, Perm, Russia*

Currently, there is a tendency to increase the volume of clinical data that many people have hidden tumors that do not develop into cancer. The fundamental problem is why these tumors do not progress into severe cancer. In the field of oncology, approaches are beginning to be considered that take into account the important fact that the occurrence of cancer, its spread and counteraction to this is associated with a change in the mechanical phenotype of cells and tissues caused by damage (cell damage, tissue damage). The aim of this work is to develop methods of multiscale space-time analysis of cell structures using the original data of laser interferometry as a new paradigm in biophysics and biomedicine, namely experimental and theoretical study of damage to biological objects on the basis of “in-situ” registration of data of in vivo dynamics of mechanobiological characteristics of cells to justify the phenotypic markers of cancer. The cell lines of adenocarcinoma and epithelial breast cells MCF-7 and MCF 10A respectively were investigated. Table 1 shows detailed information about the materials of the study.

Table 1. Research materials.

Title	Description	Number of measured/processed cells
MCF-7	human breast cancer cell line	110/93
MCF-10A	human “normal” breast epithelial cell line	106/100

Cell dynamics was studied using laser interference microscope MIM-340 based on the method of measurement of optical thicknesses of cells. In Fig. 1 is depicted spatial distribution (Fig. 1,a) and fluctuations (Fig. 1,b) of the cancer cell MCF-7 optical thickness. Processing of the original data of the dynamics of fluctuations of the phase thicknesses of normal and cancer cells justified the use of space-time invariants to assess the quality of changes in healthy and cancer cells associated with damage.

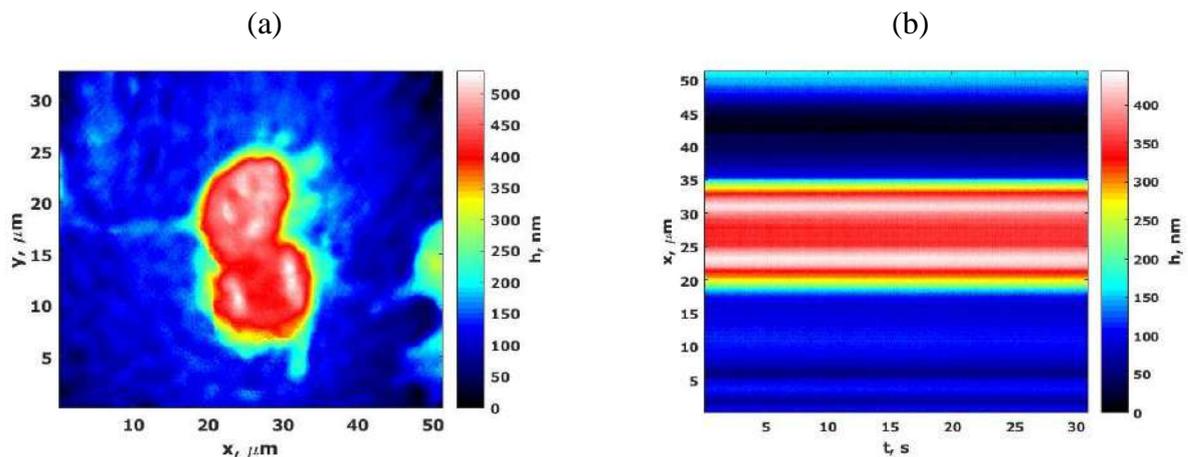


Fig. 1. Cell phase image and track diagram of the MCF-7 cell culture

Standardized algorithms and programs to analyze the dynamics of fluctuations in the cell structures according to laser (interference) microscopy to determine the quantitative parameters of spatial-temporal invariants to determine the change in mechanobiology properties due to damage. These parameters can be used as phenotypic markers determining the stage of cancer development.

The work was financially supported by the Russian Federation via the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project identifier RFMEFI60718X0202).

DOI: 10.17223/9785946218412/17

ADHESIVE CONTRIBUTION TO FRICTION

Popov V. L.

Technische Universität Berlin, Germany

1990s were the years of a new birth of tribology. Among the most fundamental understandings of this time was the essential importance of *elastic instabilities*. If a tip of an atomic force microscope is forced to slowly move along an atomically flat surface, than the macroscopic force of friction, that is tangential force averaged over a macroscopic distance, is exactly zero, provided the cantilever of the AFM is stiff enough [1]. In other words, if the tip follows continuously the moving stage, there is no friction in the system. The situation changes qualitatively if the stiffness is smaller than some critical value. Then the tip does not follow the stage continuously any more but shows sudden jumps. These jumps, known as elastic instabilities, cause irreversible energy dissipation – in form of waves going away from the contact region.

Theoretically, the key importance of elastic instabilities was illustrated in the famous paper by Ludwig Prandtl [2-4]. He developed a very simple model explaining the mechanism of energy dissipation in the case when the system is purely elastic. Prandtl used this model as a model for plasticity and only mentioned briefly that it is even better applicable for describing friction. Many years later, the Prandtl model became a standard model in interpreting experiments on nanoscale friction between a tip of an atomic force microscope and atomically smooth surfaces such as graphite or mica.

The concept of elastic instabilities lead further to the concept of structural superlubricity. If two bodies with atomically smooth periodic surfaces are in contact, then final friction appears only if they have equal or similar periods. In the case of incommensurate lattice periods, the friction is vanishing. This is especially easy to illustrate by rotating one crystalline body relatively to the other one. In commensurate orientation, there is high friction. However, friction practically disappears if the surfaces are not oriented so that they match each other [5].

But exactly this fundamental understanding puts the question of what is the mechanism of friction in hard, amorphous, elastic smooth surfaces as we have e.g. in the contact of an DLC coating with another hard surface. The problem is that such surfaces are elastic, so that they show no plasticity and no viscosity, they are amorphous and thus intrinsically incommensurate to each others and they are smooth which is equivalent to high enough later stiffness of individual asperities for preventing elastic instabilities. Thus, there is no energy dissipation due to plasticity, no due to viscosity and no due to elastic instabilities. The friction should vanish, but in reality, final friction is observed.

In the present paper we discuss a contribution to friction which is present even in a contact of amorphous elastic bodies. This contribution is due to adhesion. Adhesive contacts show hysteresis due to "adhesive instability" even in the cases when the bodies are completely elastic [6]. The adhesion hysteresis does exist independently of whether the contacts are soft or very stiff. Measurements of adhesion forces with atomic force microscopes show that there exist "adhesion hysteresis" which manifests itself in different apparent specific work of adhesion in the phases of approach and detachment.

In the present talk, we report results of numerical simulation of adhesive contacts of rough surfaces using the full three-dimensional Boundary Element Method (BEM) [7]. Large-scale numerical simulations confirm the existence of the adhesion hysteresis and reveal a veil over the mystery of this effect [8]. The difference in apparent adhesion energies appears due to instable jumps of contact area, leading to irreversibility of the processes of both spreading and detaching adhesive contact. These instabilities on the nano-scale lead to effective force of friction acting on the boundary of an adhesive contact. Similar effects occur during tangential relative movement of two bodies in adhesive contact. The instabilities lead to appearance of friction force even if both bodies are elastic. The reported results not only provide new insights into fundamental mechanisms of friction but also may serve as designer rules for systems with hard elastic coatings with applications in nanomanufacturing.

1. Socoliuc A. Bennewitz R., Gnecco E., and Meyer E. Transition from Stick-Slip to Continuous Sliding in Atomic Friction: Entering a New Regime of Ultralow Friction // *Phys. Rev. Lett.* 2004, V. 92, 134301.
2. Prandtl L. Ein Gedankenmodell zur kinetischen Theorie der festen Körper. *ZAMM*, 1928, V. 8, P. 85-106.
3. Popov V.L., Gray J.A.T. Prandtl-Tomlinson model: History and applications in friction, plasticity, and nanotechnologies // *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 2012, V. 92, P. 683-708.
4. Popov V.L., Gray J.A.T. Prandtl-Tomlinson Model: A Simple Model Which Made History. In: *The History of Theoretical, Material and Computational Mechanics-Mathematics Meets Mechanics and Engineering*, 2014, P. 153-168.
5. Dienwiebel M. et al. Superlubricity of graphite // *Phys. Rev. Lett.* 2004, V. 92, 126101.
6. Johnson K. L., Kendall K., Roberts A. D. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids // *Proc. Royal Soc. Lond. A*, 1971, V. 324. P. 301–313.
7. Popov V. L., Pohrt R., Li Q. Strength of Adhesive Contacts: Influence of Contact Geometry and Material Gradients // *Friction*, 2017, V. 5. P. 308–325.
8. Li Q., Pohrt R., and Popov V.L. Adhesive Strength of Contacts of Rough Spheres, *Front. Mech. Eng.* 2019, V. 5. 7, doi: 10.3389/fmech.2019.00007

DOI: 10.17223/9785946218412/18

**STRUCTURE AND TRIBOMECHANICAL PROPERTIES OF EXTRUDABLE
ULTRA-HIGH MOLECULAR WEIGHT POLYETHYLENE COMPOSITES
FABRICATED BY 3D-PRINTING**

^{1,2}Panin S.V., ^{1,2}Buslovich D.G., ¹Kornienko L.A., ²Dontsov Yu.V., ¹Bochkareva S.A.

¹ *Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk, Russia*

² *National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

Currently, the world scientific community intensively deals with development of topical issues of additive manufacturing for polymer and polymer-based composite materials and products that are widely used in many industries (aircraft, ship-building, mechanical engineering, medicine, etc.). Thermoplastic polymers with high melt flow index (ABS, PA, PVB, PVC, PU, PPS, PEEK, PI) are conventionally used as feedstocks. Their composites are of high strength, but possess large value of friction coefficient and insufficiently high wear resistance to be used as antifriction materials in metal–polymer systems. Polyolefins (in particular, UHMWPE) are practically not employed to develop feedstocks in additive manufacturing technologies. Meanwhile, UHMWPE possesses a number of unique properties (wear resistance, low friction coefficient, bioinertness, etc.) that determines its exclusive fields of application. Ultra-high molecular weight polyethylene (UHMWPE) having sufficiently high strength properties, and also a low value of friction coefficient, high wear and chemical resistance in aggressive media is used in friction units of machines and mechanisms, as well as in medicine for manufacturing parts of orthopedic implants. However, due to the long polymer chains UHMWPE has nearly zero melt flow rate (MFR) that significantly limits its processability by traditional and advanced technologies: screw extrusion, injection molding, layer-by-layer extrusion (Fused Deposition Modeling), etc. For this reason, improving the manufacturability of UHMWPE in terms of extrudability as well as its composites is of relevance.

The structural–functional analysis has been conducted for antifriction UHMWPE based composites aimed at development feedstocks for additive manufacturing of complex shape friction units for operation in harsh conditions (low temperatures, aggressive media, high sliding velocities and loads). In order to improve the extrudability of UHMWPE the problem of the optimal choice of polymer plasticizers from the industrially produced thermoplastics was solved. In order to efficiently accelerate the development of extrudable UHMWPE based composites with a minimum amount of experimental data an algorithm is proposed to determine control parameters (recipes). The latter gives the required (restrictive) values to the effective characteristics of multicomponent polymer-polymer composites. This allows achieving their predescribed tribological, mechanical and technological properties. In order to determine the effective characteristics depending on the values of the control parameters the analysis of experimental data is carried out to construct the corresponding response surfaces in the space of states. The surfaces obtained make it possible to reveal the range of values of the control parameters providing achievement of the specified characteristics of the tribomechanical and technological properties of multicomponent composites.

With the use of this algorithm, the optimal content of a three-component mixture "UHMWPE + 17 wt. % HDPE-g-SMA + 12 wt. % PP" was revealed with tribomechanical properties being equal to unfilled UHMWPE while at melt flow index being appropriate for 3D–printing by the Fused Deposition Modeling (FDM). A comparative analysis of the structure, mechanical and tribological properties of the multicomponent composition "UHMWPE + 17 wt. % HDPE-g-SMA + 12 wt. % PP" fabricated by means of the FDM and hot pressing was carried out. It is shown that extrudable 3D printed UHMWPE based composites over their tribomechanical properties (wear resistance, friction coefficient, elastic modulus, yield strength, tensile strength, elongation) exceed similar characteristics of compression sintered composites. The latter is associated with the formation of a more uniform permolecular structure with increased crystallinity. Extrudable composites with UHMWPE matrix at optimal content of plasticizing fillers ("UHMWPE + 17 wt. % HDPE-g-SMA + 12 wt. % PP") as well as composites with solid lubricant fillers (nanohydroxyapatite, carbon nanofibers) were fabricated and investigated. The tribotechnical properties of 3D–printed composites were studied under various triboloading conditions ($P * V$). It is shown that extrudable UHMWPE based composites fabricated by the FDM can be used in friction units operating in a wide range of velocities and loads.

The use of extrudable UHMWPE based composites in additive manufacturing technologies will reduce the time and energy costs of production as well as expand the range of wear-resistant products of complex shape for friction units in mechanical engineering and medicine.

DOI: 10.17223/9785946218412/19

ACTIVE BIO CONTACT MECHANICS: CONCEPTS OF ACTIVE CONTROL OF WEAR AND GROWTH OF THE CARTILAGE IN NATURAL JOINTS

Popov V.L.

Technische Universität Berlin

The modern practice of treating patients with impaired motor functions often consists in replacing the natural joints with artificial ones. Currently, more than 1.5 million hip joint replacements are performed annually in the world, with a tendency to grow. Even if the replacement procedure is successful, replacement is often ineffective in the medium or long term, due to various complications. The necessity and importance of endoprosthetics in cases of significant damage to the joints, or with severe wear or partial destruction of the cartilage layer, as well as its damage during prolonged immobility, is beyond doubt. However, at the initial stage of the disease and deterioration of the mechanical properties of the joint, it is natural to ask what measures need to be taken to correct the situation and allow the joint to regenerate itself.

It is known that under certain conditions, the cartilage layer is able to regenerate. Namely, it is possible to restore damaged cartilage due to the growth of new cartilage tissue on its surface. This process is determined by the mitotic division of chondroblasts inside the perichondrium. The process of regeneration of cartilage tissue is extremely slow and depends on many factors, such as the type of damage. In this case, the key role is played by the type of mechanical loading of the articular joint. Mechanical loading plays a dual role. On the one hand, the load is necessary to maintain the normal functioning of the cartilage. Cartilage tissue does not contain blood vessels. The nutrition of cartilage cells is due to the diffusion of nutrients and oxygen from the synovial fluid located in the inter-articular space. To activate these diffusion processes, periodic mechanical loading of the joint is necessary. On the other hand, excessive mechanical loading can lead to wear and discontinuities in the cartilage body.

Therefore, the topical question is how to mechanically load the joint to promote the development of regenerative effects, while minimizing the influence of factors determining wear. In this presentation, the main principles of how to determine the type and nature of the mechanical action, which leads to the growth of the cartilage layer of the joints and its regeneration, will be discussed. Such mechanical action can then be used as a rehabilitation procedure or a physio-therapeutic procedure to preserve the function of the natural joint.

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций»

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия
Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, Россия
Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Россия
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Россия
Министерство науки и высшего образования РФ
Сибирское отделение РАН, Россия
Томский политехнический университет, Россия
Томский государственный университет, Россия
Институт механики сплошных сред УрО РАН, Россия
Институт машиноведения УрО РАН, Россия
Институт физико-технических проблем Севера СО РАН, Россия
Институт химии нефти СО РАН, Россия
Берлинский технический университет, Германия
Штутгартский университет, Германия
Технион – Израильский технологический университет, Израиль
Институт Йозефа Стефана, Словения
ТП «Медицина будущего», Россия
ТП «Легкие и надежные конструкции», Россия
ТП «Национальная информационная спутниковая система», Россия
ТП «Технологии добычи и использования углеводородов», Россия

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели оргкомитета

ПАНИН Виктор Евгеньевич
Томск, Россия

ФОМИН Василий Михайлович
Новосибирск, Россия

Члены оргкомитета

Алтунина Л.К. Томск Россия
Аннин Б.Д. Новосибирск, Россия
Берто Ф. Трондхейм, Норвегия
Батаев А.А. Новосибирск, Россия
Горкунов Э.С. Екатеринбург, Россия
Горячева И.Г. Москва, Россия
Гутманас Э. Хайфа, Израиль
Зуев Л.Б. Томск, Россия
Карпинтери А. Турин, Италия
Лебедев М.П. Якутск, Россия
Лотков А.И. Томск, Россия
Ляхов Н.З. Новосибирск, Россия
Макаров П.В. Томск, Россия
Марущак П.О. Тернополь, Украина
Мулюков Р.Р. Уфа, Башкортостан

Наймарк О.Б. Пермь, Россия
Панин А.В. Томск, Россия
Панин С.В. Томск, Россия
Прентковскис О. Вильнюс, Литва
Попов В.Л. Берлин, Германия
Си Дж. Бетлехем, США
Сундер Р. Бангалор, Индия
Ту Ш.Т. Шанхай, Китай
Халиманович В.И. Красноярск, Россия
Церпес К. Патрас, Греция
Чернявский А.Г. Королев, Россия
Шанявский А.А. Москва, Россия
Шилько Е.В. Томск, Россия
Шмаудер З. Штутгарт, Германия

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель

Панин С.В., Томск, Россия

Члены комитета

Восмериков А.В. Томск, Россия	Коротаев А.Д. Томск, Россия	Скрипняк В.А. Томск, Россия
Дмитриев А.И. Томск, Россия	Кульков С.Н. Томск, Россия	Соколова М.Д. Якутск, Россия
Князева А.Г. Томск, Россия	Плехов О.А. Пермь, Россия	Смирнов С.В. Екатеринбург, Россия
Колесникова К.А. Томск, Россия	Ружич В.В. Иркутск, Россия	Тюменцев А.Н. Томск, Россия

ИСПОЛНИТЕЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель

Колесникова К.А.

Члены комитета

Тимкин В.Н.	Нейман А.А.	Надежкин М.В.	Орлова Д.В.	Еремин А.В.
Биргкаем А.А.	Мишин И.П.	Гудимова Е.Ю.	Дедова Е.С.	Бурков М.В.

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

Секция 1. Основные принципы и методология
физической мезомеханики материалов
с иерархической структурой

DOI: 10.17223/9785946218412/20

**НОВАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ДИСПЕРСНОГО АРМИРОВАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ
МАТЕРИАЛОВ КАК НОВАЯ ЗАДАЧА ПЕРКОЛЯЦИОННОЙ ТЕОРИИ**

¹Гергега А.Н., ²Крывченко Ю.В.

¹ Научно-производственный центр, Одесса, Украина

² Одесская национальная академия пищевых технологий, Одесса, Украина

aherega@gmail.com

В работе [1] предложена новая технология армирования гетерогенных материалов, получаемых из растворов, смесью стального порошка и фибры. Результаты компьютерного моделирования и экспериментальных исследований, проведенных ранее авторами [2], показали, что в подобных материалах при критической концентрации заполнителя возникает связанная область перколяционного типа, наличие которой объясняет наблюдающиеся экстремальные зависимости прочностных свойств [3, 4].

В докладе представлена перколяционная модель упрочняющего структурного фазового перехода, в которой изучены строение и свойства кластерной системы заполнителя, образующейся при использовании технологии, описанной в [1]. Для этого сформулирована и исследована новая континуальная перколяционная задача, описывающая кластерную систему с квазиточечными и квазилинейными элементами.

Задача решается методом Монте-Карло в кубе размером 10^6 ячеек. Положение элементов, из которых формируется модельный кластер, определяет генератор случайных чисел с равномерным распределением, он же выбирает углы поворота фибры относительно ребер куба. Элементы кластера считаются соединенными, если у них есть общая точка либо расстояние между ними не превышает некоторое заданное, играющее в модели, как и длина фибры, роль управляющего параметра.

В модели рассчитаны величины порогов протекания и фрактальных размерностей кластеров заполнителя, а также получена характеристическая кривая зависимости перколяционного порога от соотношения долей фибры и порошка. Показано, что интервалы изменений этих величин излишне широки, а характеристическая кривая в виде кривобочной гиперболы, по сути – «толстая» линия, заполняющая некоторую часть плоскости.

Этот феномен обнаруживает интересную особенность перколяционной задачи с необычным составом элементов, а значит, и самой технологии – невозможность обеспечить статистическую устойчивость явления. Потеря стабильности при фиксированном значении максимального угла поворота фибры и ее длины связана с зависимостью интервалов значений порога протекания и фрактальной размерности от степени вариативности параметров конкретных реализаций перколяционного кластера, которая, как оказалось, очень велика. Обсуждение ситуации возможно в рамках представления о гиперслучайных величинах, для которых «статистические оценки в общем случае не являются состоятельными, т.е. при увеличении объема выборки их погрешность не стремится к нулю» [5].

Помимо упрочнения материала металлическим заполнителем, в докладе анализируется обнаруженная авторами работы [1] возможность повышения прочности материала за счет слоя, образующегося в зоне контакта цементного теста со сталью, а также механических напряжений, возникающих в местах контакта этого слоя с затвердевшим бетоном. В рамках предложенной модели получен геометрический критерий возникновения таких напряжений в условиях уменьшения объема бетона при гидратации.

Кроме того, в докладе прослежена аналогия между результатами дисперсного армирования гетерогенных материалов и эффектом дальнего действия в полупроводниках и металлах [6], в которых существует экстремальная зависимость электропроводности и механических свойств от концентрации дефектов.

1. А.Г. Вандоловский и др. Технология создания сталефибробетона с повышенной прочностью на растяжение. / Сб. трудов Харьковского нац. университета воздушных сил. 2018. Т. 2 (56). С. 126-131.

2. А.Н. Гергега, А.И. Костюк, И.А. Столевич. Эффект дальнего действия как универсальное свойство твердых тел. /

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

- Сб. трудов Всерос. конференции «Механика и наномеханика структурно-сложных и гетерогенных сред». Москва. 2015. С. 71-76.
3. J. Feder. Fractals. New York: Plenum Press, 1988.
4. A. Herega. The Selected Models of the Mesostructure of Composites. Heidelberg: Springer, 2018.
5. И.И. Горбань. Гиперслучайные функции и их описание. // Известия вузов. Радиоэлектроника. 2006. Т.1. С.3-15.
6. А.Н. Герега. Моделирование кластерных структур в материале: силовые поля и дескрипторы. // Физическая мезомеханика. 2013. Т. 16, №5. С. 87-93.

DOI: 10.17223/9785946218412/21

КРИТИЧЕСКИЕ РАЗМЕРЫ ЗЕРЕН МЕЗОУРОВНЯ

Конева Н.А., Тришкина Л.И., Попова Н.А., Черкасова Т.В.

Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, Россия

Почти все используемые в промышленности материалы являются поликристаллами. Поэтому важно знать влияние размера зерен поликристаллов на их механические свойства. Это касается поликристаллов как микро-, так и мезоуровня. Мезоуровень охватывает интервал размеров зерен от 10 мкм до 1 нм, микроуровень – от 1 мкм до 3 нм. Количественные исследования зеренной структуры и механических свойств поликристаллов микроуровня позволили выделить два критических размера зерен [1]. Это такие средние размеры зерен, в окрестности которых происходят значительные изменения свойств поликристаллического агрегата. На микроуровне установлено существование двух критических размеров зерен. Определим эти размеры.

Первый критический размер зерна на микроуровне связан с соотношением Холла-Петча (Х-П). Классическое соотношение (Х-П):

$$\sigma = \sigma_0 + kd^{-1/2} \quad (1)$$

определяет зависимость предела текучести поликристалла σ от размера зерна d . В этом соотношении σ_0 – сопротивление деформированию монокристалла, k – коэффициент Х-П. коэффициент k является важной характеристикой зернограницного упрочнения. В ряде работ установлена зависимость коэффициента Х-П от размера зерна. С уменьшением размера зерна коэффициент Х-П k уменьшается. При некотором малом размере зерна k становится равным нулю и далее с уменьшением размера зерна k становится отрицательным. Первый критический размер зерна d_1^{kp} – такой размер, при котором изменяется знак коэффициента Х-П k . Величина d_1^{kp} для чистых металлов Al, Cu, Ni, Fe, Ti близка к 10 нм [1]. При $d > d_1^{kp}$ $k > 0$ при $d < d_1^{kp}$ $k < 0$. Смена знака коэффициента k означает смену зернограницного упрочнения зернограницным разупрочнением.

Второй критический размер зерна на микроуровне $d_2^{kp} \approx 100$ нм. Это такой размер, когда зерна или субзерна становятся бездислокационными. Внутризеренное упрочнение исчезает. Из-за малого размера бездислокационные зерна упрочняют микрополикристалл и вносят изменения в механизмы его деформации.

Исследования, выполненные авторами настоящей статьи, показали, что в области мезоуровня также существуют критические размеры зерен. Эшби [2] для установления природы упрочнения поликристаллов ввел понятия геометрически необходимых дислокаций (ГНД) и статистически запасенных (СЗД), так что скалярная плотность дислокаций

$$\rho = \rho_s + \rho_G, \quad (2)$$

где ρ_s – плотность СЗД, ρ_G – плотность ГНД.

ГНД определяют неоднородность деформации и ее градиенты, обусловленные наличием прочных барьеров для движения дислокаций – границ зерен, частиц второй фазы. СЗД тормозятся более слабыми барьерами – другими дислокациями.

В настоящей работе методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии было проведено изучение эволюции дислокационной структуры при деформации ряда поликристаллических материалов (твердые растворы Cu-Al и Cu-Mn, аустенитная сталь 110Г13, стали мартенситного класса). Исследования проводились в широком интервале размеров зерен от 250 мкм до ультрамелкозернистых. Деформация осуществлялась при комнатной температуре растяжением и сжатием со скоростью $10^{-2}c^{-1}$. С использованием параметров изгибных экстинкционных контуров были выполнены измерения ρ_G . Методика измерения представлена авторами ранее. Известным методом секущей определялась средняя скалярная плотность дислокаций $\langle \rho \rangle$. С использованием этих данных и соотношения (2) получали значения ρ_s .

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

Из анализа полученных экспериментальных результатов было установлено, что соотношение между ρ_G и ρ_S существенно зависит от размера зерен (см. рис. 1).

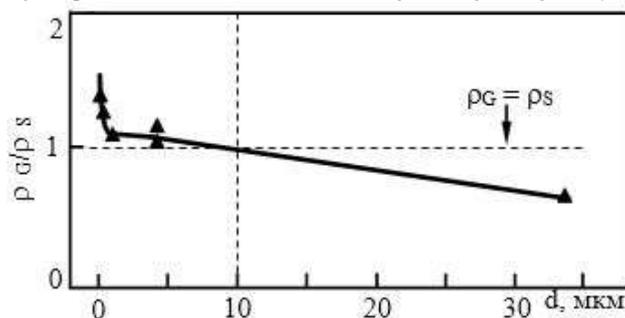


Рис.1. Соотношение ρ_G/ρ_S в зависимости от размера (d) зерен и субзерен.

Вертикальный пунктир обозначает критический размер зерен.

В области мезоуровня размеров зерен в дислокационном ансамбле преобладают СЗД. При этом доля ГНД с уменьшением размера зерна возрастает. При достижении размера зерен $d \approx 10$ мкм устанавливается соотношение $\rho_G = \rho_S$. При дальнейшем уменьшении размера зерен доля ГНД в дислокационном ансамбле растет, и при приближении к размеру зерен 200...300 нм дислокационная структура полностью реализуется ГНД ($\rho \approx \rho_G$). Таким образом, в области мезоуровня размеров зерен установлено существование критического размера зерна $d_3^{kp} \approx 10$ мкм. Если $d > d_3^{kp}$ в дислокационном ансамбле преобладают СЗД. При $d < d_3^{kp}$ плотность ГНД больше плотности СЗД. В этих условиях формируется градиентная дислокационная структура, обеспеченная полями напряжений от дисклинаций, расположенных в границах зерен и тройных стыках.

Было установлено, что в области мезоуровня размеров зерен есть еще один критический размер $d_4^{kp} \approx 100$ мкм. При $d > 100$ мкм скорость накопления дислокаций с деформацией резко ослабевает. При этом размер дислокационных ячеек слабо зависит от размера зерен. При $d > 100$ мкм кривизна кристаллической решетки почти не зависит от размера зерен. На рисунке 2 представлены зависимости параметров дефектной структуры сплава Cu + 0.4 ат.% Mn от размера зерен.

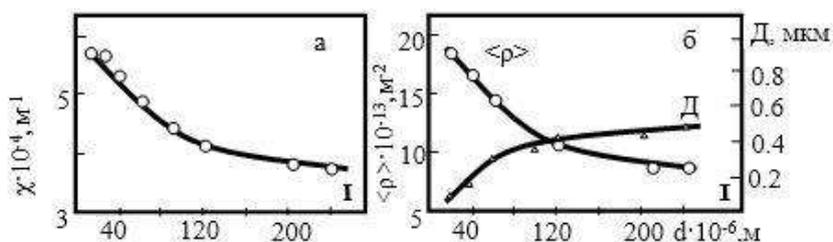


Рис. 2. Зависимости кривизны-кручения кристаллической решетки χ (а), плотности дислокаций ($\langle \rho \rangle$), размера ячеек (D) от размера зерна $\langle d \rangle$. Сплав Cu + 0.4 ат.% Mn.

$$\epsilon_{ист} = 0.60, T_{деф} = 293 \text{ К.}$$

Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что при достижении $d_4^{kp} \approx 100$ мкм основную роль в накоплении дефектов при деформации играют внутризеренные процессы, роль границ зерен ослабевает. С этим согласуется поведение механических характеристик. Так, коэффициент деформационного упрочнения на стадии II (θ_{II}) при $d > 100$ мкм почти не зависит от размера зерен. При $d < 100$ мкм θ_{II} резко возрастает с уменьшением размера зерен.

Исследования выполнены при поддержке государственного задания на проведение научных исследований по проекту №3.8320.2017/БЧ.

1. Glezer A.M., Kozlov E.V., Koneva N.A., Popova N.A., Kurzina I.A. Plastic Deformation of Nanostructured Materials. – London, New York: CRC Press., 2017. – 321 p.
2. Ashby M.F. // Philos. Mag. – 1970. – V.21. – №170. – P.399-424.

DOI: 10.17223/9785946218412/22

**ИЕРАРХИЧЕСКАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ СТРУКТУР
НЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ**

Семухин Б.С., Воинов А.В.

Томский архитектурно-строительный университет, Томск, Россия

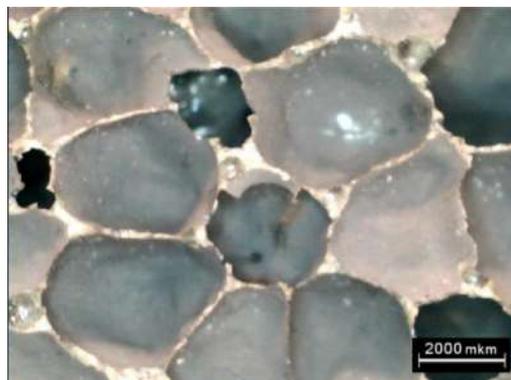
На сегодняшний день общепринятая классификация делит все материалы на кристаллические и не кристаллические. К числу последних относится громадное количество материалов называемых органическими и неорганическими. В настоящей работе рассмотрена иерархическая структура на мезоуровне неорганических веществ- жидкостей. В качестве объектов выбрана жидкость – пеностекло и жидкость - обыкновенная вода. Показано, что при синтезе пеностекла с применением нанопорошков диоксида циркония удается получить мезоструктуру состоящую из ячеек в виде пентагонов и гексагонов. Приводятся экспериментальные данные, свидетельствующие о том, что чем больше образуется пентагонов, то есть мезообъемов с симметрией пятого порядка, тем выше прочностные, акустические и теплотехнические свойства пеностекла. Дается объяснение этому факту. Согласно Шехтману (Нобелевский лауреат 2011) при наличии определенных условий материал начинает перестраивать субструктуру, ограниченную определенными размерами и формой стремясь к тому, что наблюдается в живой природе. Дан Шехтман говорит о переходной стадии материи. Таким образом, жидкость необходимо относить к промежуточному состоянию материи между идеальным кристаллом и идеальным органическим соединением.

Во второй части работы показано, что, используя симметризованное магнитное поле, удастся улучшить свойства другой жидкости - простой воды. В качестве доказательства служит универсальная зависимость прорастания семян, полученная экспериментально и объясняющая эффект малых доз при прорастании.

Таким образом, иерархическое строение наблюдается в самых различных материалах и в разных состояниях.



a



b

Упорядоченные структуры пор пеностекла с добавкой диоксида циркония 1,1 % вес.: a – «пентагон»; b – «гексагон»

DOI: 10.17223/9785946218412/23

**ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЕ ОПИСАНИЕ ФЛУКТУИРУЮЩИХ ПОЛЕЙ
ДЕФОРМАЦИЙ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ**

Ташкинов А.А., Шавшуков В.Е.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

Поликристаллические материалы имеют сложную гетерогенную структуру стохастической природы. На мезоскопическом масштабе механические поля (деформаций и напряжений) являются быстроосциллирующими и сильно флуктуирующими случайными функциями координат. Флуктуации обусловлены как случайной микроструктурой поликристалла так и упругим взаимодействием зерен. Упругое взаимодействие по своей природе является дальнедействующим, поэтому теоретические модели описания поведения поликристаллов должны учитывать взаимодействие большого числа зерен.

Некоторые макроскопические механические свойства поликристаллов (например, упругие модули), слабо зависят от размеров флуктуаций полей, тогда как другие, такие как зарождение трещин в режиме сверхвысокоциклового усталости, определяются почти исключительно экстремальными флуктуациями, возникающими в отдельных зернах специфических кластеров микроструктуры. Для нахождения таких больших флуктуаций нужно проанализировать все возможные состояния всех зерен поликристалла во всевозможных конфигурациях микроструктуры. В настоящей работе такая задача решается с помощью теоретико-полевого подхода в механике поликристаллических материалов [1].

Для неоднородных мезодеформаций в зернах $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi)$, где верхний индекс ξ нумерует зерна, получена точная система интегральных уравнений [2]

$$\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \varepsilon_{ij}^* + \int_{\omega_\xi} d\vec{r}'_\xi g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\xi) C'_{klmn}(\vec{r}'_\xi) \varepsilon_{mn}^{(\xi)}(\vec{r}'_\xi) + \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta g_{ijkl}(\vec{r}_\xi - \vec{r}'_\eta) C'_{klmn}(\vec{r}'_\eta) \varepsilon_{mn}^{(\eta)}(\vec{r}'_\eta), \quad (1)$$

в которой второй и третий члены в правой части отражают внутризеренное и межзеренное взаимодействие деформаций, а ε_{ij}^* есть однородная макродеформация. Для приближенного решения (1) разбиваем каждое зерно на большое количество субзерен и представляем внутризеренные мезодеформации в виде суперпозиции субзеренных полей, каждое из которых полагаем постоянным в пределах субзерна, с помощью индикаторных функций субзерен (латинские индексы нумеруют субзерна) $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_\xi) = \sum_{a=1}^n \lambda_a(\vec{r}_\xi) \varepsilon_{ij}^{(a)(\xi)}$. В результате система интегральных уравнений (1) для локальных полей трансформируется в систему линейных алгебраических уравнений для сублокальных полей

$$\left[I_{ijmn} - B_{ijmn}^{(aa)(\xi)} \right] \varepsilon_{mn}^{(a)(\xi)} = \varepsilon_{ij}^* + \sum_{b \neq a} B_{ijmn}^{(ab)(\xi)} \varepsilon_{mn}^{(b)(\xi)} + \sum_{\eta \neq \xi} \sum_{e=1}^n B_{ijmn}^{(ae)(\eta)} \varepsilon_{mn}^{(e)(\eta)}, \quad (2)$$

где I_{ijmn} - единичный тензор, а коэффициенты

$$B_{ijmn}^{(ab)(\xi)} \equiv \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) \cdot C'_{klmn}(\vec{r}'_b) \quad \text{и} \quad B_{ijmn}^{(ae)(\eta)} \equiv \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) \cdot C'_{klmn}(\vec{r}'_b) \quad (3)$$

описывают взаимодействие субзерен в одном зерне и в разных зернах соответственно и находятся численно для каждой конкретной микроструктуры поликристалла. Коэффициенты (3) медленно уменьшаются с расстоянием, лишь на расстоянии в 6-7 средних диаметров зерна интенсивность взаимодействия падает до 1-3% от взаимодействия ближайших соседних зерен.

Система (2) решается с помощью теории возмущений по межзеренному взаимодействию. С точностью в несколько процентов можно ограничиться первым порядком по взаимодействию. При этом в суммах правой части необходимо оставить значительное число зерен-соседей, в силу дальнедействующего характера взаимодействия. Решение (2) в

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

нулевом порядке по взаимодействию дает решение Эшелби для одиночного включения. Вклад взаимодействия отдельных зерен аддитивен.

Для поиска экстремальных состояний зерен и микроструктур при заданной макродеформации сначала в нулевом приближении находятся ориентации зерен с максимальными мезодеформациями. Затем ищутся максимальные аддитивные вклады от взаимодействия с соседними и удаленными зернами. Аддитивность вкладов сокращает размер статистических выборок при поиске экстремальных состояний отдельного зерна и окружающей микроструктуры на много порядков. Для сферического зерна при одноосном макрорастяжении максимальная деформация в зерне, обусловленная взаимодействием, превышает макродеформацию более чем в три раза (для разных анизотропий). Абсолютный максимум достигается вблизи границ зерна. Максимуму в любой точке зерна соответствует вполне определенная конфигурация окружающей микроструктуры поликристалла. Эти микроструктуры образуют симметричные паттерны. Паттерны содержат до 3000 и более зерен. Характерной особенностью паттернов является наличие в их центральных областях субкластера одинаково ориентированных зерен вокруг рассматриваемого зерна. Субкластер фактически есть одно большое зерно с размером 3-4 средних диаметра. Экспериментально подтверждено зарождение микротрещин в таких субкластерах [3]. Вероятность случайного образования экстремальных паттернов при получении поликристаллов достаточно мала (порядка нескольких тысячных процента). Однако, это может быть одной из причин большого разброса экспериментальных значений усталостных характеристик поликристаллических материалов в высокоцикловых и сверхвысокоцикловых режимах.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Пермского края грантами 18-01-00675 и 17-41-590433-р_а.

1. V.Shavshukov and A.Tashkinov. Quantum Field Theory Approach to Mechanics of Polycrystals // Solid State Phenomena. 2016. Vol.243. Pp 131-138.
2. Шавшуков В.Е. Экстремальные флуктуации деформаций в поликристаллических материалах // Физическая мезомеханика. 2018. Т.21. № 5. С. 67-75.
3. M.Oja, K.S.R. Chandran and R.J.Tyron. Orientation Imaging Microscopy of Fatigue Crack Formation in Waspaloy: Crystallographic conditions for crack nucleation // Int. J. Fatigue. 2010. V.32. Pp 551-556.

DOI: 10.17223/9785946218412/24

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ТРАБЕКУЛЯРНОЙ КОСТНОЙ ТКАНИ

^{1,2}Зайцев Д.В., ^{1,2,3}Гилев М.В., ³Измоленова М.Ю.

¹Уральский Федеральный университет, Екатеринбург

²Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург

³Уральский государственный медицинский университет, Екатеринбург

Трабекулярная кость - это биоккомпозит, в микроструктуре которого выделяют до семи структурных уровней, но для качественного описания его микроструктуры достаточно привести три. Первый уровень – это минерализованные коллагеновые волокна (диаметром ≈ 100 нм). На втором уровне, группируясь в слои, волокна формируют костные пластинки толщиной около 7 мкм, которые образуют костные перекладины или трабекулы губчатого вещества – третий структурный уровень. Целью данной работы было изучение механизмов деформации и разрушения, и их связи с микроструктурой, в трабекулярной кости субхондральной области при одноосном сжатии в зависимости от величин прикладываемой нагрузки и общей деформации.

Исследования было проведено на цилиндрических образцах, изготовленных из фрагментов трабекулярной костной ткани субхондральной области. Диаметр и высота образцов была 6 мм. Забор материала для исследования осуществлялся согласно протоколу экспериментального исследования, который был одобрен локальным этическим комитетом ФГБОУ ВО УГМУ, Екатеринбург. Испытания на одноосное сжатие проводили на испытательной машине Shimadzu AG-X 50kN со скоростью нагружения 0,5 мм/мин. Испытания проводились, как до разрушения – появления макроскопических трещин, так и по заданному режиму поэтапного нагружения и разгрузки образца. Согласно этому режиму, нагрузка осуществлялась до достижения заданной величины общей деформации, далее следовала разгрузка образца. Поэтапное нагружение осуществлялось с шагом 0,5% до 10% деформации, далее с шагом 1% до 15% деформации. Микроструктуру костной ткани аттестовывали на сканирующем электронном микроскопе JSM-6390 LV. Для определения относительной плотности костной ткани, до испытания, была проведена компьютерная томография образцов на томографе Toshiba Aquilion 64.

Деформационное поведение образцов из трабекулярной кости при одноосном сжатии было подобно поведению упруго-пластичных тел. Показано, что трабекулярная кость способна, как к упругой, так и пластической деформации даже при наличии в ней трещин. При появлении макроскопических трещин в образце упругие свойства начинают незначительно снижаться. Несмотря на наличие трещин в образцах и суммарной деформации $\sim 40\%$, образцы не распадались на части после испытания. При каждом последующем шаге нагружения, величина упругой деформации возрастала до 15%, а затем начинала снижаться. Пластическая деформация достоверно появлялась с $\sim 3\%$ и монотонно увеличивалась с каждым шагом нагружения. Деформация до $\sim 3\%$ является только упругой и, поэтому ее можно расценивать, как безопасной, тогда как при деформации, превышающей 3% в трабекулярной кости возникают необратимые деформации, что в реальных условиях приводит к возникновению импрессионного перелома.

Работа выполнена при поддержке РФФИ №18-38-20097.

1. Зайцев Д.В., Гилев М.В., Измоленова М.Ю. Механизмы разрушения трабекулярной костной ткани околоуставной локализации при импрессионном переломе // Деформация и разрушение материалов. 2019. № 9. С. 25–31.
2. Гилев, М.В., Зайцев Д.В., Киселева Д.В., Измоленова М.Ю. К вопросу о патомеханике внутрисуставных импрессионных переломов костей конечностей // Российский журнал биомеханики. 2018. Т. 22, № 2: 154–165.
3. Зайцев Д.В., Гилев М.В., Измоленова М.Ю. Глава №4 Исследование механизмов деформации и разрушения в трабекулярной костной ткани субхондральной области околоуставной локализации при импрессионном переломе. Перспективные материалы и технологии в 2 т под редакцией В.В. Клубовича. Т2, 2019, -Витебск: УО «ВГТУ» -317 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/25

ЭВОЛЮЦИЯ ОТ МИКРО-, К МЕЗО- И МАКРОСКОПИЧЕСКОМУ МАСШТАБНОМУ УРОВНЮ УСТАЛОСТИ МЕТАЛЛОВ

^{1,2}Шанявский А.А., ¹Солдатенков А.П.

¹Авиационный регистр Российской Федерации, Московская область, Химки

²Институт автоматизации проектирования РАН, Москва

Рассматривается последовательность протекания процессов накопления повреждений в металле в направлении возрастания уровня напряжения. Показано, что область многоциклового усталости, соответствующая мезомасштабному уровню накопления повреждений, проявляет расслоение усталостных кривых в области перехода от микро- к мезомасштабному уровню (от сверхмногоциклового к многоциклового усталости). Приведены примеры бимодального распределения усталостной долговечности применительно к титановому сплаву ВТ9 на мезомасштабном уровне, для которого зарождение трещин происходит с поверхности, но оно характеризуется двумя разными усталостными кривыми. Обсуждена природа этого явления и показано различие механизмов зарождения трещин для каждой из ветвей усталостных кривых.

Обсуждается последовательность эволюции металла при его циклическом нагружении на основе ранее введённой бифуркационной диаграммы [1]. На основании рассмотренного расслоения усталостных кривых на мезомасштабном уровне введено представление о мультимодальном распределении усталостной долговечности в области между соседними масштабными уровнями в зависимости от соотношения между пределом усталости и текучести материала.

Проведено обобщение результатов усталостных испытаний авиационных материалов на основе Fe, Al, Mg, Ti, Cu и Ni и проанализирована эволюция в поведении металла при определении так называемого «предела усталости» в зависимости от таких механических характеристик, как предел текучести и прочности металла. Используются справочные материалы ВИАМ [3] по результатам усталостных испытаний материалов, выполненных в соответствии с существующим стандартом [2]. Испытания реализованы в условиях различных видов симметричного изгиба гладких образцов.

Выявлено, что для более 90% металлов полная диаграмма усталости реализуется на трёх масштабных уровнях (рис. 1). На каждом масштабном уровне механизм накопления повреждений в металле принципиально отличается. Приведены представления об этих различиях на основе подходов и принципов Физической мезомеханики. Из этого следует, что область макроскопического масштабного уровня, которая ранее была использована для моделирования поведения металла на мезомасштабном уровне, не применима к подавляющему большинству конструкций. Они не испытывают остаточные деформации на макроскопическом масштабном уровне и роль поверхности в накоплении повреждений на мезомасштабном уровне имеет иную природу, чем в области малоциклового усталости.

В области сверхмногоциклового усталости (микромасштабный уровень) поведение металла отражает его свойство сопротивляться циклической нагрузке, т.к. состояние его поверхностного слоя не влияет на накопление повреждений в связи с зарождением трещин на удалении от поверхности. Рассмотрены механизмы зарождения трещин на удалении от поверхности на микроскопическом масштабном уровне, учитывающие результаты исследований состояния материала под поверхностью излома в очаге разрушения.

Выполненное обобщение показывает, что накопленный экспериментальный материал по испытанию металлов на разных масштабных уровнях требует построения усталостных кривых с разными параметрами, характеризующими различия в поведении металла на разных масштабных уровнях. Необходимо ввести границы масштабов для каждого материала и выявлять на границах масштабов области мультимодального распределения усталостной долговечности. Ранее введённое представление о «пределе усталости», как характеристике предельного состояния металла, не соответствует его поведению с учётом

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

проведённого анализа масштабной иерархии в эволюции механизмов накопления повреждений. Поэтому существующее представление о пределе «усталости металла» дезориентирует металлургов и конструкторов при определении ресурса элементов авиационных конструкций в разных условиях нагружения.

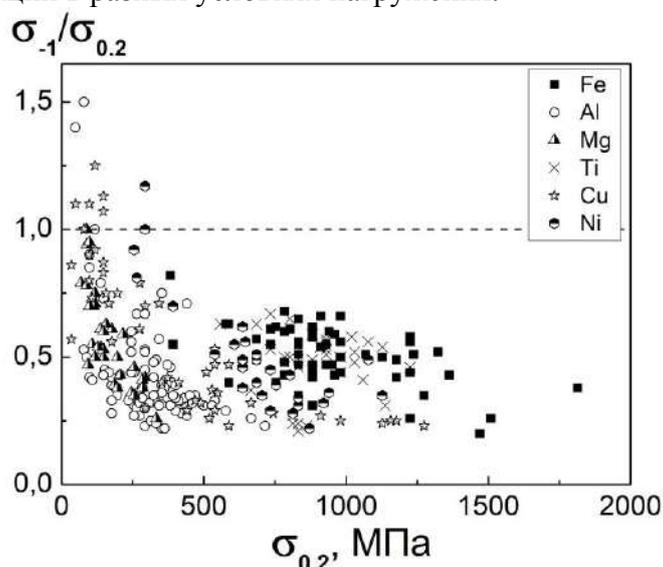


Рис. 1. Зависимость соотношения $\sigma_{-1} / \sigma_{0.2}$ от $\sigma_{0.2}$, построенные по данным из справочника [3] для авиационных материалов на основе Fe, Al, Mg, Ti, Cu и Ni

Многомасштабный подход в построении усталостных кривых позволяет сделать следующее заключение.

Во-первых, моделирование процессов накопления повреждений в металлах должно быть основано на разных механизмах деформирования материала, которые систематизированы и распределены по масштабам в рамках научного направления Физическая мезомеханика.

Во-вторых, в случае эксплуатационного нестационарного нагружения, когда осуществляется суммирование повреждений на разном уровне напряжения, необходимо вводить границы масштабов для параметров усталостных кривых, которые описывают повреждение материала в разных условиях накопления повреждений. Границы масштабов характеризуются областями бимодального распределения усталостной долговечности для предыдущего (меньшего) масштаба к последующему (большему) масштабному уровню. Эти границы определяются не количеством циклов нагружения, а критическим уровнем напряжения.

Таким образом, к настоящему времени возникла необходимость пересмотра не только существующих представлений об усталости металлов, но и принципов построения усталостных кривых, которые регламентированы ГОСТом [2].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-19-00705).

1. Шанявский А.А. Масштабные уровни процессов усталости металлов // Физическая мезомеханика. 2014. Т. 17. № 6. С. 87–98.
2. ГОСТ 25.502-79 «Расчеты и испытания на прочность в машиностроении. Методы механических испытаний металлов. Методы испытаний на усталость». Издательство «Стандарт», 2005.
3. Авиационные материалы. Справочник в девяти томах (под ред. А.Т. Туманова). М.: ВИАМ, 1973–1975.

DOI: 10.17223/9785946218412/26

**ФРАКТАЛЬНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ ПОВЕРХНОСТИ РАЗРУШЕНИЯ ПОРИСТОГО
ZrO₂ - MgO**

^{1,2,3}Буяков А.С., ³Зенкина Ю.А., ^{1,2,3}Буякова С.П., ^{1,2,3}Кульков С.Н.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

³Томский политехнический университет, Томск

Пористые материалы – это особый класс материалов, функциональное назначение которых определяется не только физико-химическими свойствами исходных компонент, но и структурным состоянием в целом. Большой интерес представляют материалы с иерархически организованной полимодальной поровой структурой. Такие материалы способны выполнять роль фильтрующих мембран, носителей катализаторов или остеозамещающих матриц. Одним из основных параметров пористых материалов является «развитость» поверхности, не имеющим четкого числового определения, и являющегося интегральным обобщением таких характеристик, как размер и форма пор, их связность, шероховатость поверхности и т.д.

С точки зрения биомедицинского применения широкий интерес представляет пористый композит ZrO₂-MgO, компоненты которого обладают комплексом свойств, необходимых для остеозамещающего материала, а наиболее благоприятными условиями, для обеспечения успешной остеоинтеграции, являются бимодальная пористость и развитая микроструктура поверхности, необходимые для пролиферации и адгезии клеток преостеобластов.

В работе исследованы композиты ZrO₂-MgO, поровая структура которых представлена микропорами, 1-8 мкм, и макропорами, 20-50 мкм. Изучено влияние состава и длительности спекания на размер зерна, пористость и кинетику изменения размеров пор. Методом вертикальных сечений по РЭМ снимкам определена фрактальная размерность поверхности разрушения.

Средний размер макропор снижался с увеличением продолжительности спекания, в то время как микропоры увеличивались. Кинетика изменения среднего размера микро- и макропор с увеличением длительности спекания говорит о стремлении системы к установлению унимодальной поровой структуры за счет объемной усадки и коалесценции пор.

Изменения фрактальной размерности отражают стадии твердофазного спекания пористого композита ZrO₂-MgO, при этом изменяется фрактальная размерность только на второй стадии.

Поскольку при длительном спекании система стремится к сближению размеров микро- и макропор и установлению унимодальной пористости возможно проанализировать влияние отношения размеров макро- и микропор, на величину фрактальной размерности. Максимальное значение фрактальной размерности, равное 1.45, достигается при переходе от первой ко второй стадии твердофазного спекания при отношении среднего размера крупных и мелких пор, равному 12.5, что свидетельствует о формировании максимально развитой поверхности.

Работа выполнена в соответствии с Программой фундаментальных исследований Ш.23 ПФНИ ГАН.

DOI: 10.17223/9785946218412/27

**НЕДИСЛОКАЦИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ ДЕФОРМАЦИИ В ЗОНАХ
ЛОКАЛИЗАЦИИ УПРУГИХ И ПЛАСТИЧЕСКИХ ДИСТОРСИЙ ПРИ
ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НИКЕЛЯ НА НАКОВАЛЬНЯХ БРИДЖМЕНА**

^{1,2}Тюменцев А.Н., ^{1,2}Дитенберг И.А., ^{1,2}Суханов И.И.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия*

²*Томский государственный университет, Россия*

tyuments@phys.tsu.ru, ditenberg_i@mail.ru, suhanii@mail.ru

В процессе интенсивной пластической деформации никеля на наковальнях Бриджмена обнаружено явление локализации деформации в области упругих дисторсий с образованием нанополос переориентации с упругой кривизной кристаллической решетки сотни град/мкм и нанодиполей частичных дисклинаций как дефектов упруго деформированной среды и носителей упругих сдвигов и поворотов на фронте распространения нанополос. Важными особенностями упруго – напряженного состояния указанных выше дефектов являются высокие локальные внутренние напряжения и градиенты этих напряжений с их максимальными значениями в плоскостях залегания нанодиполей.

Нанодиполи частичных дисклинаций являются неустойчивыми конфигурациями, которые на фронте распространения нанополос локализации упругих дисторсий трансформируются в более сложные дисклинационные ансамбли с кратным уменьшением энергии. Продвижение такого фронта включает квазипериодическую последовательность структурных трансформаций нанодиполя в систему квадруполь и обратно с периодическим изменением энергии дисклинационного ансамбля.

Молекулярно-динамическое исследование динамических дефектов, формирующихся в области упругих дисторсий, показало, что в качестве зародышей нанополос локализации упругой деформации могут выступать ансамбли динамических вихрей, размеры и геометрия атомных смещений и поворотов в которых аналогичны наблюдаемым в указанных выше нанополосах и связанных с ними нанодиполях частичных дисклинаций. Предполагается, что формирование этих вихрей в области упругих дисторсий определяет как характерные размеры (ширину) нанополос, так и саму возможность локализации деформации в этой области.

В области пластической деформации эволюция нанополос локализации деформации развивается движением нанодиполей частичных дисклинаций с участием не дислокационных мод пластической деформации: 1 - локальных обратимых (ГЦК→ОЦК→ГЦК) структурных превращений мартенситного типа с осуществлением обратных превращений по альтернативным системам; 2 - квазивязкого массопереноса потоками неравновесных точечных дефектов в полях высоких локальных градиентов давления. Наиболее важными факторами и условиями реализации этих механизмов являются высокие локальные внутренние напряжения и невозможность их дислокационной релаксации в нанокристаллах с высокими (близкими к теоретической прочности) напряжениями работы источников Франка – Рида. Это качественно разные моды деформации. Первая полностью определяется свойствами (стабильность и симметрия) кристаллической решетки; вторая может быть описана в моделях движения жидкостей.

Следствием реализации первого из указанных выше механизмов является образование нанодвойников деформации и нанополос $\approx 60^\circ\langle 110 \rangle$ или $\approx 90^\circ\langle 110 \rangle$ переориентации кристаллической решетки. Электронно-микроскопическое исследование микроструктуры, особенностей упруго-напряженного состояния и пластической деформации внутри и на фронте распространения нанополос показало, что важной особенностью их эволюции является одновременная реализация указанных выше мод деформации.

Проведен теоретический анализ скорости пластической деформации (движения фронта нанополосы) механизмами квазивязкого массопереноса потоками неравновесных точечных дефектов в зависимости от температуры деформации, концентрации и типа этих

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

дефектов. Показано, что, если в качестве таких дефектов выступают межузельные атомы, при экспериментально наблюдаемых величинах ширины нанополос, мощности нанодиполей и связанных с ними градиентов давления скорости распространения нанополос сравнимы со скоростью звука.

В условиях одновременной реализации указанных выше механизмов деформации важную роль в активизации квазивязкой моды деформации играет фазовая нестабильность кристалла в зонах обратимых структурных превращений мартенситного типа. В модели квазивязкого массопереноса потоками неравновесных точечных дефектов значительное увеличение скорости деформации может быть результатом уменьшения энергии активации образования и миграции точечных дефектов вследствие снижения упругих модулей.

Обсуждаются вопросы формирования нанокристаллических структур с предельными минимальными размерами зерен несколько нанометров; структурных состояний с высокой (сотни град/мкм) кривизной кристаллической решетки и близкими к теоретической значениями твердости; механизмы сверхвысокой технологической и структурной сверхпластичности наноструктурных металлических материалов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ, проект № 17-19-01374.

DOI: 10.17223/9785946218412/28

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРИКЦИОННОГО ИЗНОСА ПОЛИМЕРНЫХ
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С УЧЕТОМ СТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ**

^{1,2}Бочкарева С.А., ^{1,2}Гришаева Н.Ю., ^{1,2,3}Люкшин Б.А.,
¹Люкшин П.А., ^{1,4}Панин С.В., ²Артемов И.Л.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск,

²Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск

³Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

⁴Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

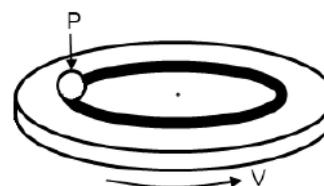
В работе моделируется процесс трибоизноса поверхности полиэфирэфиркетона (ПЭЭК) [1-3], наполненного частицами политетрафторэтилена (ПТФЭ) марки Ф-4 «флуралит», обеспечивающими твердую смазку [2, 3]. ПЭЭК обладает очень высоким модулем упругости, высокой прочностью, устойчивостью к агрессивным средам, но, чтобы использовать этот материал как антифрикционный, нужно повышать его износостойкость.

Экспериментально авторами было установлено, что одним из эффективных способов является введение частиц ПТФЭ диаметром 6-20 мкм, износостойкость возрастает при этом в 4 раза а, коэффициент трения уменьшается в 1,7 раз.

При экспериментальном изучении износостойкости полимерных композиционных материалов (ПКМ) для исследования износостойкости материалов в режиме сухого трения скольжения применяют две схемы: «шар-на-диске» (рис. 1) и «вал-колодка».



а)



б)

Рис. 1. Изображение машины трения СМТ-1 (а), схема трения по типу шарик

– диск (б)

Шар и вал – называются также контртелом, а диск и колодка представляют собой исследуемый материал. В результате испытаний оценивается площадь дорожки трения и объемный износ.

В работе экспериментальное испытание образцов на изнашивание проводили на трибометре CSEM CH-2000 в соответствии с ASTM G99 по схеме «шар-на-диске». Шарик контртела выполнен из стали ШХ15, диаметр 6 мм.

При взаимодействии контактирующих в зоне контакта одновременно реализуется большое множество элементарных фрикционных связей, происходит превращение работы сил трения в тепловую энергию трущихся тел, что приводит к изменению физико-механических свойств материалов.

Предлагаемый подход к моделированию ПКМ в условиях трибосопряжения позволяет рассчитывать температуру нагрева и температуру «вспышки» контактирующих тел и исследовать ее влияние на износостойкость. Для расчетов используется метод конечных элементов (МКЭ).

При моделировании учитывается шероховатость поверхности ПКМ, изменяющая фактическую площадь контакта, и в явном виде учитываются включения микронных размеров. На рисунке 2 представлена расчетная область для плоской постановки задачи, разбитая на конечные элементы.

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

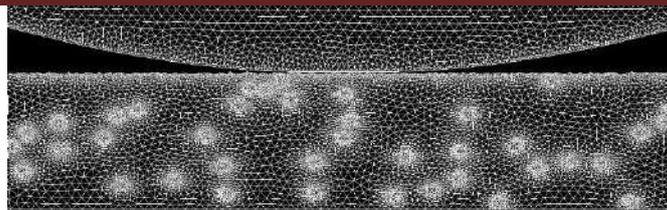


Рис. 2. Конечно-элементная сетка для расчетной области с включениями.

Применительно к расчетной области последовательно решаются две контактные задачи: 1) задача о напряженно-деформированном состоянии (НДС) покрытия с учетом нормальной и касательной нагрузок, возникающих при трении, и 2) задача нестационарной теплопроводности, позволяющая найти распределение температуры в контактирующих телах.

Задача о НДС основана на решении системы уравнений механики деформируемого твердого тела методом конечных элементов.

Расчет проводится в квазистатической постановке, время играет роль параметра, определяющего количество теплоты, полученной за счет работы сил трения.

Свойства материала в каждой конечно-элементной ячейке определяются в зависимости от того, какой материал (матрицы или включений) в этой ячейке и от температуры в ней.

На каждом шаге проверяются критерии разрушения, при их выполнении реализуется разрушение, которое моделируется удалением из расчета элементов, в которых выполнен критерий разрушения. После этого формируется новая граница контакта, и перестраивается конечно-элементная сетка. При этом возможно для включений учитывать уровень адгезии к матрице.

Величина износа вычисляется как длина зоны контакта, что соответствует площади дорожки трения в экспериментах на сухое трение скольжения. Объемный износ рассчитывается на основе площади удаленных частиц.

Полученные результаты качественно соответствуют экспериментальным данным. Предлагаемая модель позволяет оценивать влияние структурных элементов и таких характеристик, как шероховатость поверхности трибоконтакта, на износостойкость.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке: 1) ПФИ ГАН на 2013-2020 годы по направлению фундаментальных исследований 23. [Регистрационный номер НИОКР АААА-А16-116122010041-9]; 2) РФФИ №16-48-70192_p_a

1. Kumar D., Rajmohan T., Venkatachalapathi S. Wear Behavior of PEEK Matrix Composites: A Review // *Materials Today: Proceedings*. 2018. V.27. Iss. 5. P. 14583–14589.
2. Bijwe J., Sen S., Ghosh A. Influence of PTFE content in PEEK–PTFE blends on mechanical properties and tribo-performance in various wear modes // *Wear*. 2005. V. 258. P. 1536–1542.
3. Zalaznik M., Kalin M., Novak S., Jakša G. Effect of the type, size and concentration of solid lubricants on the tribological properties of the polymer PEEK // *Wear*. 2016. V. 364-365. P. 31–39.

DOI: 10.17223/9785946218412/29

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНЫХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТА С НЕОДНОРОДНОЙ МАТРИЦЕЙ

Анисимова М.А., Князева А.Г.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Синтез в режиме теплового взрыва или в режиме горения используется для получения композитов различного состава. В данной работе рассматривается композит, полученный из смеси порошков титана, углерода и алюминия (целевой фазовый состав продуктов синтеза TiC + 20 масс. % Al) (рисунок 1). По результатам рентгенограммы относительное содержание фаз в продуктах синтеза: TiC – 80 %, Al – 15 %, Al₃Ti – 5 %.

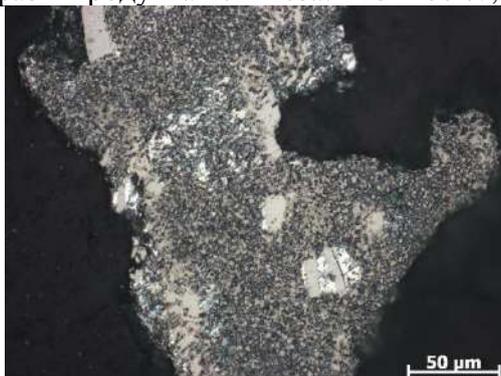


Рис. 1. Микроструктура композита (TiC + 20 wt.% Al).

Исходя из экспериментальных данных, композит может быть представлен как матрица со случайно распределенными частицами TiC. В свою очередь, матрица представляет собой композит из более мелких частиц TiC, Al и Al₃Ti (далее будем называть ее эффективная матрица).

В данной работе изучается влияние состава композита на эффективные свойства материала, такие как объемный модуль, модуль сдвига, модуль Юнга и коэффициент теплопроводности.

Эффективные свойства рассчитываются на двух уровнях. На первой стадии рассчитываются свойства эффективной матрицы, используя метод гомогенизации Максвелла в терминах тензора вклада (с учетом двух типов включений) [1], затем – свойства композита, состоящего из более крупных включений TiC и эффективной матрицы.

Так как карбид титана входит в состав композита на разных масштабах (и в качестве включений и в качестве основного материала для эффективной матрицы) необходимо учесть связь концентраций на обоих уровнях. Это значит, что при увеличении доли частиц TiC в композите, доля карбида в матрице уменьшается, а следовательно, увеличивается доля частиц алюминия и Al₃Ti в эффективной матрице. Таким образом, свойства эффективной матрицы и общие свойства композита зависят от объемной доли включений карбида титана.

Acknowledgements

This work is supported by Russian Science Foundation (RSF), grant 17-19-01425.

1. Sevostianov I., Giraud A. Generalization of Maxwell homogenization scheme for elastic material containing inhomogeneities of diverse shape // International Journal of Engineering Science. 2013. V.64. P. 23–36.

DOI: 10.17223/9785946218412/30

**ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ И
УСТАЛОСТНУЮ ДОЛГОВЕЧНОСТЬ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6 И ЕГО
СВАРНОГО СОЕДИНЕНИЯ**

¹ Смирнова А.С., ¹ Почивалов Ю.И., ^{1,2} Панин В.Е., ² Насоновская А.В.,
³ Маликов А.Г., ³ Оришич А.М.

¹ *Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

² *Томский политехнический университет, Томск*

³ *Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, Новосибирск*

Тенденции развития современного материаловедения направлены на расширение возможности управления прочностью и пластичностью материалов путем применения комбинированного воздействия на их структуру и свойства. Комбинированное воздействие может включать традиционные методы обработки в комплексе с различными вибрационными и высокоэнергетическими воздействиями, а также новые методы интенсивной пластической деформации. В настоящее время практическое применение нашли способы обработки с использованием ультразвуковых преобразователей большой мощности (порядка десятков Вт/мм²) конструкционных металлических материалов и их сварных соединений. Ультразвуковая ковка оказывает существенное влияние на структурно-фазовые превращения в поверхностном слое, что приводит к повышению служебных характеристик материалов [1-5]. В сочетании с высокочастотным электрофизическим воздействием ультразвуковая ковка позволяет обрабатывать высокопрочные материалы с низкой пластичностью.

В настоящей работе проведено исследование влияния ультразвуковой ковки (УЗК) и ультразвуковой ковки в сочетании с высокочастотным электрофизическим воздействием (ВЭВ), на структуру, механические и усталостные характеристики титанового сплава ВТ6 и его сварного соединения, выполненного способом лазерной сварки.

Ввиду того, что при лазерной сварке ВТ6 формируется узкая зона сварного шва и зоны термического влияния, поиск путей снижения данных структурных неоднородностей неразъемных соединений является важнейшим направлением. Для данных сварных соединений обработка УЗК и УЗК+ВЭВ проводилась в ЗТВ и зоне сварного шва шириной ≈ 15 мм со всех сторон.

Микроструктура титанового сплава ВТ6 после травления типична для прокатанных титановых сплавов и характеризуется ярко выраженной $\alpha+\beta$ структурой размером $\approx 0,9-10$ мкм. В ходе лазерной сварки микроструктура сплавов в области сварного шва меняется. Сварной шов $\approx 1,6-1,8$ мм имеет крупнозернистое строение размером до ≈ 500 мкм с тонкопластинчатым внутренним строением мартенситного типа, состоящего из низкотемпературной α -фазы, называемой α' -фазой, размером $\approx 5-80$ мкм.

Интенсивная пластическая деформация в результате УЗК и УЗК+ВЭВ происходит путем вытягивания зерен в направлении, параллельном касательной к канавке, которая сформирована поверхностью сферы торца цилиндрического бойка при его перемещении во время обработки [6]. Это приводит к изменению размера и формы зерна. При УЗК в поверхностном слое формируется высокодефектная структура с высокой кривизной кристаллической решетки. При совместном воздействии УЗК+ВЭВ микроструктура сварного шва вблизи поверхности при травлении не выявляется.

Таким образом, в поверхностном слое пластически деформированного металла зерна приобретают определенную ориентировку, создают так называемую текстуру деформации (поверхностный слой приобретает слоистый вид). Происходит вытягивание зерен в наклепанном слое, в направлении главной деформации.

Испытания на статическое растяжение сварных соединений титанового сплава ВТ6 показали, что после лазерной сварки прочность сварных соединений выше прочности основного металла и разрушение всегда проходит по основному металлу, независимо была

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

проведена обработка или нет. Предел прочности и предел текучести образцов с УЗК увеличивается относительно исходного сварного соединения. Однако относительное удлинение при этом уменьшается с 8,2 % до 6,3 % после УЗК.

Усталостные испытания в условиях малоциклового усталости показывают высокую эффективность наноструктурирования поверхностных слоев сварных соединений исследуемого сплава методом УЗК и УЗК+ВЭВ для повышения их усталостной долговечности (таблица 1). При циклическом нагружении сварного соединения с УЗК и УЗК+ВЭВ усталостная трещина всегда зарождается на боковой поверхности образца и распространяется по всей его ширине образца.

Таблица 1 – Число циклов до разрушения образцов сварных соединений сплава ВТ6

Материал Напряжение, МПа	Число циклов до разрушения		
	Без обработки	После УЗК со всех сторон	После УЗК+ВЭВ со всех сторон
Сварное соединение ВТ6, 600 МПа	8700±850	22500±900	29400±2000

Таким образом, проведенные усталостные испытания показывают эффективность использования диспергирования поверхностных слоев сварного соединения титанового сплава ВТ6. Усталостная долговечность сварного соединения сплава ВТ6 после УЗК+ВЭВ обработки со всех сторон, возрастает до 3,4 раз и достигает N=29400 циклов.

Экспериментальная работа выполнена в рамках программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013—2020 годы, направление III.23.1.1. и государственного задания АААА-А17-117030610122-6.

1. Ильин А.А., Колачев Б.А., Полькин И.С. Титановые сплавы. Состав, структура, свойства. – М.: ВИЛС – МАТИ, 2009. С. 520
2. Лясоцкая В.С. Термическая обработка сварных соединений титановых сплавов, под ред. Б.А. Колачева. - М.: Экомет, 2003. С. 352.
3. Панин В.Е., Панин С.В., Почивалов Ю.И., Смирнова А.С., Еремин А.В. Структурно-масштабные уровни пластической деформации и разрушения сварных соединений высокопрочных титановых сплавов // Физическая мезомеханика. 2018. Т.21, №4. С. 33–44.
4. Егорушкин В.Е. Кривизна решетки, полосы локализованного сдвига и механизм электропластического эффекта / В.Е. Егорушкин, В.Е. Панин, А.В. Панин // Физ. мезомех. 2018. – Т.21. №3. С. 5–11.
5. Прокопенко Г.И. Ультразвуковая ударная обработка металлов / Г.И. Прокопенко, Б.Н. Мордюк // Сварка и Металлоконструкции. 2015. №1. С. 10–14.
6. Кныш В.В. Оптимизация процесса упрочнения сварных соединений стали 09Г2С высокочастотной механической поковкой / В.В. Кныш, С.А. Соловей, И.Л. Богайчук // Автомат. сварка. 2011. №5. С. 26–32.

DOI: 10.17223/9785946218412/31

К ОБЪЕДИНЕННОМУ КВАНТОВАННОМУ И МЕХАНИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЯМ
МАКРОПОЛОСЫ ЛОКАЛИЗОВАННОЙ ДЕФОРМАЦИИ ЧЕРНОВА-ЛЮДЕРСА

Решетняк А.А., Шилько Е.В., Шаркеев Ю.П.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Основными задачами исследований в материаловедении являются поиски возможностей управления внутренней дефектной подструктурой кристаллитов для получения наилучших прочностных и пластических свойств поликристаллических (ПК) материалов. Оптимизация указанных свойств использует новые технологии, включающие методы ИПД и их комбинации с рекристаллизационным отжигом, метод осаждения из газовой фазы и др. [1], позволяя варьировать ориентацию, линейные размеры, d , элементов микроструктуры материалов, от мезополикристаллических и крупнозернистых (КЗ, 10–1000 мкм), до мелкозернистого (МЗ, 2–10 мкм), ультрамелкозернистого (УМЗ, 0,5–2 мкм), субмикроструктурного (СМК, 100–500 нм) и нанокристаллических (НК, <100 нм) образцов. Физико-механические свойства ПК материалов: микротвердость, H , пределы текучести, σ_y , и прочности, σ_s , имеют особенности механизма упрочнения при переходе к УМЗ, СМК и НК состояниям, отмеченными в отклонении от эмпирического соотношения Холла-Петча (ХП) [2]: $\sigma_y(d) = \sigma_0 + kd^{-1/2}$. Исследования были продолжены в работах Р. Армстронга, Г. Конрада, Ф. Кокса, Г. Лэнгфорда, А. Томпсона, Дж. Севильяна, С.А.Фирстова, Б.А.Мовчана, Ю.Я. Подрезова, В.В. Рыбина, В.А.Лихачева, Р.З.Валиева, В.Е. Панина, Э.В. Козлова, Н.А. Коневой А.И. Тюменцева, А.Д. Коротаяева. Теоретического обоснования закона ХП, объяснения наличия и поведения максимумов σ_y , σ_s и вывода аналитической связи $\sigma = \sigma(\varepsilon, d)$, при пластическом деформировании (ПД) вне концепций механики сплошной среды не имелось. В наших работах [3, 4, 5, 6] предложена теоретическая модель распределения энергии каждого кристаллита одномодального ПК материала по квазистационарным квантованным зонам (уровням конечной ширины, кристаллической решетки (КР)) при квазистатическом ПД. Энергетический спектр каждого кристаллита был выбран в 1-м приближении эквидистантным (при реализации наиболее вероятного ансамбля дислокаций с одним вектором Бюргерса, b), начиная от его нулевой энергии без дефектов, E_0 и до уровня E_n , с максимальным числом атомов на оси диаметральной (полной) дислокации, $N = N(d) = d/b$. Выражения для статистически определенной скалярной плотности дислокаций (СПД) $\rho(b, d, T)$, напряжения течения (НТ), включая, σ_y , ПК материалов при квазистатической ПД со скоростями: $\dot{\varepsilon} \sim 10^{-5} - 10^{-3} \text{ с}^{-1}$, в зависимости от среднего размера, d , кристаллитов (зерен), а также величины зеренно-границной разупрочняющей фазы были определены в [3], [4]. В [4] была предложена квазичастичная интерпретация, для кванта энергии ПД, равного энергии единичной дислокации, $E_d^{Le} = \frac{1}{2}Gb_b^3$, с эффективным вектором $b_\varepsilon = b(1 + \varepsilon)$, необходимой для создания дислокации (в рамках сценария [3] зарождения дислокации при ПД из 0D-дефектов в термофлуктуационно созданных при ПД зонах локализованной пластичности (ЗЛП)) (E_d^{Le} соизмерима с энергией активации атома в материале при диффузии [3].). Он представляет собой составную квазичастицу (из несвободных акустических фононов), названную *дислоконом*, с энергией и частотой согласно корпускулярно-волновой гипотезе де Бройля: $\hbar\omega_\varepsilon = \frac{1}{2}Gb_b^3$, которая рождается при разрыве межатомных связей при акте ПД и может поглощаться этим или другим атомом КР кристаллита, приводя к локальному восстановлению трансляционной инвариантности КР.

Квазичастичное описание позволяет и вывести квантованно СПД $\rho(b, d, T)$, и элегантно описать физику процесса зарождения и распространения макрополосы Чернова-Людера. Для этого мы вводим понятия механизма испускания и поглощения дислоконов с помощью **двухуровневой системы** для спектра энергий произвольного кристаллита одномодального ПК материала при ПД: E_m , и E_n , ($E_m < E_n$), $0 < m < n \leq N$. В процессе элементарного акта ПД при внешнем нагружении (возникновение дефекта) кристаллит в момент времени: $t = \varepsilon / \dot{\varepsilon}$, переходит из состояния с энергией $E_m(\varepsilon)$ в состояние с $E_n(\varepsilon)$ с поглощением дислокона с энергией $\hbar\omega_{\varepsilon|nm}$:

$$\hbar\omega_{\varepsilon|nm} = \frac{(n-m)}{2}Gb_b^3 = E_n(\varepsilon) - E_m(\varepsilon) \quad (1)$$

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

В этой связи введем два типа переходов из $E_m(\varepsilon)$ в $E_n(\varepsilon)$ в состоянии термодинамического равновесия зерна при заданном ε между актами ПД с минимальным временем [3] $\Delta t_0 \sim 10^{-1} \text{с} \gg \tau = a/v_{3B} \sim 10^{-12} \text{с}$, при $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \text{с}^{-1}$ и временем релаксации атомов КР в новые устойчивые положения (Процесс ПД, являясь неравновесным, представляется в виде последовательности равновесных процессов, скачкообразно меняющихся при актах ПД.). При первом (возникновение дефекта) происходит поглощение кристаллитом кванта энергии равного энергии дислокона: $E_m(\varepsilon) \rightarrow E_n(\varepsilon)$, а при втором: $E_n(\varepsilon) \rightarrow E_m(\varepsilon)$, (локальное восстановление КР, т.е. исчезновение дефекта или переход в состоянии с дефектом с меньшей энергией) его испускание. Таких кристаллитов много. Мы выделяем (следуя А.Эйнштейну) **спонтанное и вынужденное испускание** такой порции энергии и ее **вынужденное поглощение** в состоянии равновесия. Вынужденное поглощение (с появлением дефекта) происходит под влиянием только внешнего воздействия при фиксированном ε . Спонтанное испускание происходит случайно, с появлением дислоконов в разных частях кристаллита с разными свойствами (некогерентными). Вынужденное испускание при переходе $E_n(\varepsilon) \rightarrow E_m(\varepsilon)$, возможно, если локализованная порция энергии к одному из атомов в возбужденном “дефектном” состоянии приводит к испусканию (при взаимодействии кристаллита с этой порцией) дислокона со свойствами как у 1-го дислокона (когерентные волны).

Подсчет среднего числа переходов dN_{nm}^ε из $E_n(\varepsilon)$ в $E_m(\varepsilon)$ за время $dt < \Delta t_0$ во всех кристаллитах образца при спонтанных испусканиях пропорционален вероятности перехода P_{nm}^ε и числу кристаллитов N_n^ε на верхнем уровне с $E_n(\varepsilon)$ в единице объема приводит к представлению

$$dN_{nm}^\varepsilon = P_{nm}^\varepsilon N_n^\varepsilon dt. \quad (2)$$

При вынужденном (индуцированном) испускании получим за то же dt в промежутке от t до $t + dt$, что среднее число таких переходов: $dN_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}}$, пропорционально вероятности вынужденных переходов $P_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}}$, СПД $\rho(b, d, T, \varepsilon)$ с $b_\varepsilon = b_\varepsilon(\omega_{\varepsilon|nm})$ (чем больше дислокаций, а потому дислоконов в единице объема, тем больше $dN_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}}$) и заселенности N_n^ε уровня $E_n(\varepsilon)$

$$dN_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} = P_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} N_n^\varepsilon \rho(b, d, T, \varepsilon) dt. \quad (3)$$

Наконец, при вынужденном поглощении квантованной порции механической энергии кристаллитами среднее число переходов $E_m(\varepsilon) \rightarrow E_n(\varepsilon)$ во всех кристаллитах в 1м^3 : $dN_{mn}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}}$ в том же временном промежутке аналогично (3), но с заменой $(P_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}}, N_n^\varepsilon) \rightarrow (P_{mn}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}}, N_m^\varepsilon)$, с симметричными $P_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} = P_{mn}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}}$, определяемым лишь ПК материалом:

$$dN_{mn}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} = P_{mn}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} N_m^\varepsilon \rho(b, d, T, \varepsilon) dt. \quad (4)$$

Принцип детального равновесия при фиксированном ε означает, что верно равенство:

$$dN_{nm}^\varepsilon + dN_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} = dN_{mn}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} \Rightarrow \frac{N_n^\varepsilon}{N_m^\varepsilon} = \frac{P_{mn}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} \rho(b, d, T, \varepsilon)}{P_{nm}^\varepsilon + P_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} \rho(b, d, T, \varepsilon)} \quad (5)$$

В состоянии термодинамического равновесия кристаллиты заселяют уровни энергий $E_i(\varepsilon)$, $i = n, m$ в соответствии с распределением Больцмана: $W_i = C \exp\left(-\frac{E_i(\varepsilon)}{NkT}\right)$. Поскольку $\frac{N_n^\varepsilon}{N_m^\varepsilon} = \frac{W_n}{W_m}$, то из (5) и (1) при $\omega_{\varepsilon|n, n-1} = \frac{1}{2} G b_\varepsilon^3$ следует:

$$\rho(b, d, T, \varepsilon) = P_{nm}^\varepsilon / P_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} \left(\exp\left(\frac{G b_\varepsilon^3}{2NkT}\right) - 1 \right) \text{ и } \lim_{N=d/b \rightarrow \infty} \rho(b, d, T, \varepsilon) = \frac{P_{nm}^\varepsilon 2NkT}{P_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} G b_\varepsilon^3} \quad (6)$$

Из явного вида $\rho(b, d, T, \varepsilon)$ в КЗ пределе [3,4] $\rho(b, d, T, \varepsilon) = \frac{6\sqrt{2}}{\pi} \frac{\varepsilon m_0}{bd(1+\varepsilon)^3}$: с параметром полиэд-ральности m_0 , вытекает $P_{nm}^\varepsilon / P_{nm}^{\varepsilon|\text{ВЫИ}} = \varepsilon m_0 \frac{G b^2}{2kT d^2} \frac{6\sqrt{2}}{\pi}$. Аналитическая зависимость для $\sigma(\varepsilon)$, в частности σ_y , следуют из закона деформационного упрочнения Тейлора [3] без ЗГ фазы.

Полученный вывод $\sigma(\varepsilon)$ одновременно открывает путь к описанию физической природы макрополосы локализованной ПД Чернова-Людерса в ПК материалах, явно возникающей при наличии площадки текучести, как макроскопическое явление сопровождающееся вынужденным квазикогерентным (из-за не-идентичности и изотропности распределения кристаллитов в ПК агрегате) испусканием коллективных фононов (дислоконов), что проявляется в кратном усилении акустической эмиссии таких образцов [7].

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

Схематично, для этого введем простую 3-уровневую систему с третьим промежуточным уровнем E_m, E_k, E_n , ($E_m \ll E_k < E_n$), $0 < m < k < n \leq N$ с выходом вне рамок эквидистантного спектра энергий кристаллита. На площадке текучести, (в случае аустенитных сталей) при квазистатическом ПД растяжением во всех кристаллитах множественно образуются ЗЛП, в которых, происходит инверсная заселенность N_n^ε ($N_n^\varepsilon > N_k^\varepsilon > N_m^\varepsilon$) уровней энергии кристаллитов с E_n при заданной ε за счет вынужденного локализованного поглощения кристаллитом энергии. Термодинамически каждому кристаллиту энергетически выгодно образовывать дефектно-дислокационную субструктуру с наименее возможной энергией, когда ($N_n^\varepsilon < N_k^\varepsilon < N_m^\varepsilon$). Время жизни дефекта с энергией E_n мало и со случайным испусканием дислоконов кристаллит перейдет в состояние с меньшей энергией дефекта E_k с заселенностью ($N_n^\varepsilon < N_k^\varepsilon$ и $N_k^\varepsilon > N_m^\varepsilon$). Выделенная при этом энергия ($N_n^\varepsilon - N_k^\varepsilon$)($E_n - E_k$) идет на дальнейшее расширение размера ЗЛП. Это происходит до тех пор пока, в каком-то кристаллите, у края ПК образца, где стадия течения наиболее выражена с максимальной инверсной заселенностью ($N_k^\varepsilon > N_m^\varepsilon$) возникает множественный переход из состояния кристаллита с энергией E_k в состояние с E_m с множественным выделением потоков энергии (за счет вынужденного испускания квазикогерентных дислоконов). Выделившаяся энергия дислоконов передается вдоль атомов кристаллита от одной ЗЛП к другой ЗЛП, приводя к их объединению и повторению процесса выделения дислокационной энергии и доходит до границы зерна. Далее процесс развивается в уже в подготовленном заранее соседнем кристаллите с инверсной заселенностью уровней энергии кристаллита в своих ЗЛП и т.д. В результате макрополоса Чернова-Людерса прорастает визуально от границы образца к противоположной его границе и возникает фронт ее распространения как автоволны вдоль нагружения по всему образцу. Макрополос может быть много, если описанные выше условия для реализации инверсной заселенности уровней энергии кристаллитов могут быть повторены.

Механически этот процесс обеспечивается за счет того факта, что в ЗЛП под действием высоких локальных внутренних напряжений происходят так называемые мартенситные превращения обеспечивающие прямой переход из ГЦК γ -фазы КР в ОЦК $\alpha(\alpha')$ фазу, а затем обратно с образованием за счет комбинаций частичных дислокаций Шокли дефектов двойникового типа, с наименьшей энергией и уже с уменьшенными значениями локальных напряжений в кристаллите с зарождением макрополосы, а затем и в последующих кристаллитах.

Предложенная модель для объяснения физики макрополосы Чернова-Людерса может быть использована и для объяснения родственного ей эффекта Портевена-Ле-Шателье. Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований РАН на 2013-2020 гг.

1. R.Z, Valiev A.P, Zhilyaev T.G. Langdon, Bulk Nanostructured Materials: Fundamentals and Applications, Wiley & Sons, New Jersey, 2014.
- 2 E.O. Hall. // Proc. Roy. Soc.B. 1951. V.64. P.747–753; Petch N.J., //J. Iron Steel Inst. 1953. V.174. P.25–28.
3. Reshetnyak A.A., Statistical approach to flow stress and generalized Hall-Petch law for polycrystalline materials under plastic deformations // e-print - arXiv:1803.08247[cond-mat.mtr-sci].
4. Reshetnyak A.A., Peculiarities of temperature dependence for generalized Hall-Petch law and two-phase model for deformable polycrystalline materials // e-print - arXiv: 1805.08623[cond-mat.mtr-sci].
5. Reshetnyak A.A., On statistical quantized approach to flow stress and generalized Hall-Petch law for deformable polycrystalline materials. Temperature-size effect. (submitted in Phys. Rev. B)
6. Reshetnyak A.A., Sharkeev Yu.P., Two-phase model of the polycrystalline aggregate with account for grain-boundary states under quasi-static deformation // AIP Conference Proceedings. –2018. V.2056, 1p.020251 e-print - arXiv:1809.03628[cond-mat.mes-hall].
7. Л.Б. Зуев, В.И.Данилов, Б.С.Семухин, Пространственно-временное упорядочение при пластическом течении твердых тел // УФМ.–2002.–Т.3.–№3.–С.237–304.

DOI: 10.17223/9785946218412/32

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАКОПЛЕНИЯ
НЕОБРАТИМЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ В АМГ-6 В ПРОЦЕССЕ ГИГАЦИКЛОВОЙ
УСТАЛОСТИ**

Банников М.В., Билалов Д.А., Оборин В.А., Наймарк О.Б.
Институт механики сплошных сред УрО РАН

В работе приведена методика «in situ» определения накопления необратимых усталостных повреждений, основанная на анализе нелинейных проявлений сигнала обратной связи в замкнутой системе ультразвуковой усталостной установки. В режиме сверхмногоциклового (гигациклового) усталости проявляются аномалии упругих свойств материала, что приводит к эффекту нелинейности в амплитуде колебаний. Данный эффект возрастает с иницированием и ростом усталостной трещины. Методика была применена к образцам из сплава АМГ-6 с предварительным динамическим деформированием при различных уровнях среднего напряжения для определения момента иницирования и роста усталостной трещины в режимах сверхмногоциклового усталости. Показано, что методика применима для раннего обнаружения усталостных трещин как на поверхности, так и внутри материала при циклическом нагружении в ультразвуковом режиме. Получены определяющие соотношения в рамках модели среды с дефектами для описания зарождения усталостной трещины в сверхмногоцикловом диапазоне нагружения. Результаты математического моделирования находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

Усталостное нагружение проводилось на ультразвуковой [1] испытательной машине резонансного типа Shimadzu USF-2000 при уровнях напряжений 90-162 МПа и симметричном цикле $R=-1$. Принцип работы испытательной машины заключается в том, что в системе Генератор-волновод-образец образуется стоячая волна. При этом максимум амплитуды перемещений приходится на торцы образца, а максимум амплитуды напряжений на его центр. Со стороны свободного торца образца закреплен индуктивный датчик, позволяющий определять перемещения торца с точностью десятых долей микрон и частотой до 1 МГц

В процессе эксперимента $\beta_{relative}$ незначительно увеличивается на начальном этапе, что обычно связывают с эффектом нагрева образца и, вследствие этого, изменением его линейных размеров [2-4], затем основную часть времени эксперимента амплитуда второй гармоники остается постоянной и значительно увеличивается при образовании усталостной трещины и её росте. Амплитуда второй гармоники связывается с деформацией, вызванной системой дефектов. При задаваемых параметрах нагружения макроскопически система находится в упругой области, и все деформации являются обратимыми. Дефекты слабо коррелируют между собой, а амплитуда второй гармоники мала и слабо изменяется, однако в процессе многочисленных циклических сдвигов образуются необратимые повреждения, которые начинают взаимодействовать друг с другом, что приводит впоследствии к образованию усталостной трещины.

Широкодиапазонные определяющие соотношения [5-7], описывающие связь кинетики поврежденности, обусловленной дефектами, с релаксационными свойствами материалов, использованы для построения математической модели, способной описывать деформационное поведение металлов и сплавов при усталостном нагружении.

Численное исследование поведения реальной конструкции и даже лабораторного образца в режиме гигациклового усталости не представляется возможным в связи с требованием огромных вычислительных и временных ресурсов. Поэтому вместо решения краевой задачи рассматривается задача нагружения представительного объёма материала с условиями нагружения в виде приложенных циклических напряжений по гармоническому закону

Секция 1. Основные принципы и методология физической мезомеханики материалов с иерархической структурой

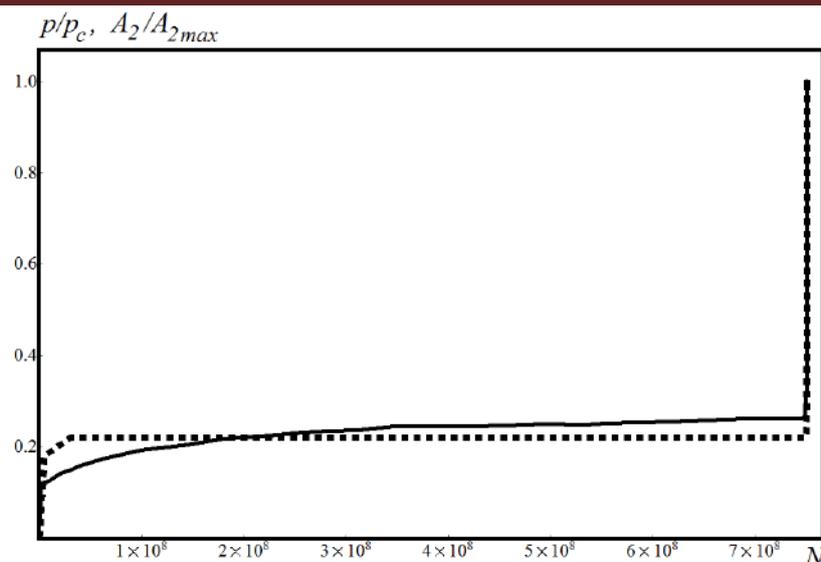


Рис.1. Кинетика дефектов (пунктирная линия) в расчёте и изменение амплитуды второй гармоники перемещений в эксперименте (сплошная линия)

На рис. 1 изображены нормированные кривые изменения параметра p , отнесённого к p_c и амплитуда второй гармоники перемещений, отнесённая к её максимальному значению. На рис.1. представлены экспериментальные данные, соответствующие предварительно нагруженному образцу. Согласно предложенной модели, изменение структуры за счёт предварительного нагружения описывается в терминах параметра δ . А именно – предварительно нагруженному образцу соответствует меньшее значение начального условия δ_0 .

Таким образом, предложенная модель способна адекватно описывать поведение материала в режимах много- и гигацикловой усталости. Опираясь на результаты численного моделирования, можно сделать вывод о том, что изменение амплитуды второй гармоники перемещений в эксперименте даёт адекватную информацию о накоплении повреждённости в материале.

1. Bathias C., Paris P.C. Gigacycle Fatigue in Mechanical Practice. – Marcel Dekker Publisher Co, 2005. – 328 p.
2. Froustey C., Naimark O., Bannikov M., Oborin V. Microstructure scaling properties and fatigue resistance of pre-strained aluminium alloys (part 1: AlCu alloy // European Journal of Mechanics A/Solids, 2010.– 29.– Pp. 1008-1014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2010.07.005>
3. Oborin V.A., Bayandin Yu. V., Bilalov D. A., Sokovikov M. A., Chudinov V. V., Naimark O. B. Self-similar laws of damage development and evaluation of the reliability of alloys D16T and AMg6 under combined dynamic and gigacycle loading // Phys. Mezomekh, 2018.– 21(6).– Pp. 135-145 DOI: 10.1134/S1029959919020048
4. John H. Cantrell, William T. Yost Nonlinear ultrasonic characterization of fatigue microstructures // Int. J. of Fatigue, 2001.– 23.– Pp.487–490. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0142-1123\(01\)00162-1](https://doi.org/10.1016/S0142-1123(01)00162-1)
5. Билалов Д.А., Баяндин Ю.В., Наймарк О.Б. Математическое моделирование процесса разрушения сплава АМг2.5 в режиме много- и гигацикловой усталости // Вычислительная механика, 2018. – 11(3) .– с. 323-334. DOI: <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2018.11.3.24>
6. Naimark O.B. Collective properties of defects ensembles and some nonlinear problems of plasticity and fracture // Physical mesomechanics, 2003.– 6(4), pp. 39-63.
7. Mikhail Bannikov, Dmitry Bilalov, Vladimir Oborin, Oleg Naimark Damage evolution in the AMg6 alloy during high and very high cycle fatigue, Frattura ed Integrità Strutturale, 49 (2019) 383-395; DOI: 10.3221/IGF-ESIS.49.38

DOI: 10.17223/9785946218412/33

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕУПРУГИХ СВОЙСТВ ПОРОД ПРИ ГИДРОРАЗРЫВЕ

Тримонова М.А., Фасхеев И.О.

Институт динамики геосфер РАН, Москва

На данный момент гидроразрыв пласта является самой распространенной технологией стимуляции нефтегазовых коллекторов при добыче полезных ископаемых. Высокая стоимость и техническая сложность данной технологии не позволяют проводить большое количество натуральных испытаний, поэтому большое значение имеют лабораторные эксперименты и компьютерное моделирование. В то же время, активное развитие вычислительной техники и теории распространения трещин позволяют создавать все более точные симуляторы гидроразрыва.

Распространение трещин при гидроразрыве для упругих пород является достаточно хорошо изученной научной проблемой. Однако, большое количество работ по данной проблематике показывает, что для точного моделирования распространения трещин в среде недостаточно уравнений, полученных исключительно в рамках упругого режима деформирования и очень важно рассматривать влияние пластичности материала. Например, пластичность, возникающая вблизи наконечника распространяющегося разрушения, может существенно влиять на предел прочности.

Недавно в Институте физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН была проведена серия экспериментов по изучению механического поведения модельных гипсовых образцов. Были проведены испытания по определению пределов прочности при одноосном растяжении и сжатии, а также по изучению ползучести образцов.

Данная работа направлена на изучение влияния пластичности при гидроразрыве. Результаты вышеуказанных экспериментов были использованы для численного моделирования с помощью программного пакета Abaqus Student Edition. Были смоделированы образцы по геометрии и механическим свойствам аналогичные изученным в экспериментах, и получено распределение упругопластических деформаций по всему образцу. Данное исследование может помочь в определении влияния неупругих свойств материала на давление разрыва, которое является одним из ключевых параметров при проведении операции гидроразрыва на реальных коллекторах.

1. Papanastasiou P. The influence of plasticity in hydraulic fracturing. International journal of Fracture, 84: 61–79. (1997).
2. Stefanov Y.P. Deformation localization and fracture in geomaterials. Numerical simulation. Phys. Mesomechanics 5 (5-6), pp. 67–77. (2002).
3. Stefanov Y.P. Numerical investigation of deformation localization and crack formation in elastic brittle-plastic materials. International Journal of Fracture. Volume 128, Issue 14, pp 345-352. (2004).
4. М. Тримонова, Н. Баришников, и др. Estimation of the Hydraulic Fracture Propagation Rate in the Laboratory Experiment. Physical and Mathematical Modeling of Earth and Environment Processes edited by V. Karev et al. (Springer International Publishing, Moscow, 2018). pp. 259-268.
5. М. Тримонова, Н. Баришников, Е. Зенченко, П. Зенченко, С. Турунтаев. The Study of the Unstable Fracture Propagation in the Injection Well: Numerical and Laboratory Modeling. SPE-187822-MS. (2017).

Секция 2. Неустойчивость и локализация
деформации и разрушения в материалах
с иерархической структурой

DOI: 10.17223/9785946218412/34

ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ РЕНИЯ ПРИ КОМНАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

¹Панфилов П.Е., ²Горностырев Ю.Н.

¹Уральский федеральный университет, Екатеринбург

²Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

Деформационное поведение рения остается загадочным, несмотря на то что прочностные свойства ГПУ-металлов подробно описаны в литературе. Одной из особенностей прочностных свойств этого тугоплавкого ГПУ-металла ($T_{\text{плав}}=3186^{\circ}\text{C}$) является аномально сильное упрочнение при деформировании и, как результат, термомеханическая обработка рения оказывается практически невозможной даже при повышенных температурах. Сообщается, что основными механизмами пластической деформации монокристаллов рения являются базисное и призматическое скольжение. В докладе обсуждается деформационное поведение поликристаллического рения при комнатной температуре и возможные причины его плохой обрабатываемости. Исследования проводили на образцах, полученных по технологиям, которые применяются при производстве рения: порошковой металлургии (ПМ) и электронно-лучевого переплава (ЭЛП). В качестве схем нагружения использовали прокатку, 3-х точечный изгиб и сдвиг под давлением. При прокатке пластины ПМ металла разрушались практически сразу после приложения нагрузки, тогда как ЭЛП металл выдерживал обжатие в 15-20% за один проход. При этом поверхность заготовки оказывалась покрытой трещинами, распространяющимися как внутри зерен, так и по межзеренным границам. При изгибе ПМ металл выдерживал изгиб до 4-6%, тогда как ЭЛП металл разрушался практически без деформации. Сравнение с поведением крупнозернистого сплава Ti4Al при изгибе показало, что механическое поведение ПМ рения близко к данному сплаву титана (при том, что сплав упрочняется значительно сильнее!), тогда как ЭЛП рений разрушается как этот сплав – за счет проскальзывания по границе зерна в области перегиба. При сдвиге под давлением, ПМ рений распадался на мелкие куски при малых поворотах до 15° , тогда как ЭЛП металл выдерживал поворот в 180° , после чего начинали разрушаться высокопрочные наковальни Бриджмена. Измерение микротвердости по Виккерсу показало, что ЭЛП металл демонстрирует значительное упрочнение. Деформационное поведение поликристаллического рения при комнатной температуре представляется довольно необычным: в зависимости от геометрии нагружения он может демонстрировать как хрупкое, так и пластическое поведение. При прокатке ЭЛП рений способен выдерживать значительные обжатия, при этом на поверхности заготовок возникает большое количество трещин. Этот же металл при изгибе ведет себя как хрупкий материал, а при сдвиге под давлением – как пластичный. ПМ рений, наоборот, при прокатке и сдвиге под давлением ведет себя как хрупкий материал, а при изгибе демонстрирует вязкое поведение. Большое количество зернограницных трещин, возникающих при холодной прокатке ЭЛП металла, рост которых оказывается заблокированным, указывает на наличие в поликристаллическом рении конкурирующего с растрескиванием канала релаксации упругой энергии. В данном случае это зернограницное проскальзывание, которое можно наблюдать в крупнозернистых образцах цинка, кадмия или сплава Ti4Al, но не дислокационное скольжение в объеме зерна. На это указывает и незначительное упрочнение образцов при прокатке и изгибе. Напротив, высокая пластичность ЭЛП рения при сдвиге под давлением достигается скорее всего за счет базисного и призматического скольжения, что приводит к сильному упрочнению материала. Данную «странность» можно связать с обстоятельством, что по шкале гомологических температур, комнатная температура является для рения очень низкой, когда напряжение течения (начала движения дислокаций) оказывается сравнимым с пределом прочности (напряжением открытия трещины). Действительно, если геометрия нагружения оказывается толерантной к росту трещины (прокатка и изгиб) деформация и разрушение конкурируют между собой и поликристаллический ведет себя на хрупкий манер. Если же схема приложения нагрузки эффективно «подавляет» рост трещин (сдвиг под давлением), то поведение рения оказывается пластическим. Работа выполняется при поддержке РФФ (грант № 18-19-00217).

DOI: 10.17223/9785946218412/35

АВТОВОЛНЫ ЛОКАЛИЗОВАННОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В УСЛОВИЯХ СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТИ

Данилов В.И., Орлова Д.В., Горбатенко В.В., Данилова Л.В.

Институт физики прочности материаловедения СО РАН, Томск

В работе исследована эволюция полей деформации в образцах никелида титана в условиях одноосного растяжения. Образцы состава 55,76 мас. % Ni + 44,24 мас. % Ti были закалены от температуры 1073 К в воде. При комнатной температуре они находились в состоянии R-фазы и обладали сверхэластичностью. В процессе растяжения производилась визуализация очагов локализации макродеформации методом цифровой корреляции спекл-изображений (DIC). Метастабильная R-фаза при деформировании претерпевала фазовый переход в состояние B19'. На деформационной кривой (рис. 1) этот процесс был представлен площадкой текучести с хорошо оформленным зубом текучести. В ряде случаев после первого спада напряжения наблюдался еще один. После окончания площадки текучести производилась принудительная разгрузка образца с такой же скоростью, как и при нагружении.

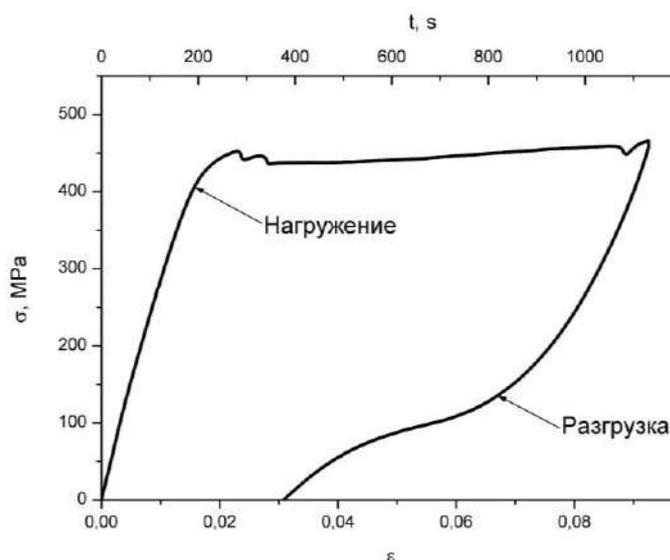


Рис. 1. Диаграмма деформирования образца никелида титана

Установлено, что деформационно-индуцированное фазовое превращение осуществляется посредством формирования у захватов испытательной машины двух полос превращения, подвижные границы которых представляют собой фронты локализованной пластической деформации (рис. 2). При этом сбросы напряжения соответствуют моментам прорастания полос сквозь поперечное сечение образца.

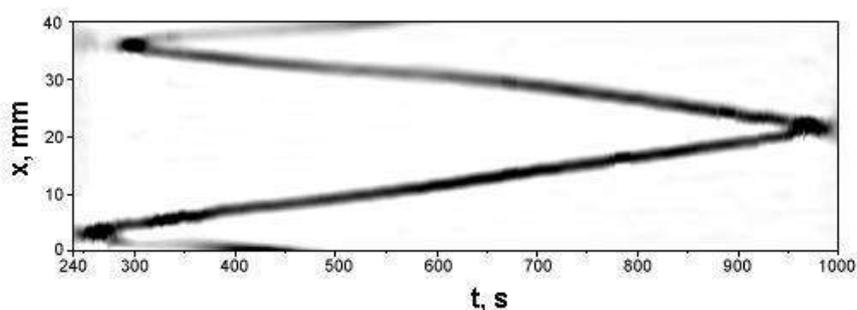


Рис. 2. Хронограмма фронтов фазового превращения при нагружении

Фронты движутся навстречу друг другу и аннигилируют при встрече. Скорости фронтов взаимно обусловлены. Сумма их модулей остается постоянной. Величины скоростей

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

определяются продолжительностью площадки текучести и возрастают с ростом скорости перемещения подвижного захвата испытательной машины.

$$\sum_{i=1}^N |V_f^i| = \frac{l_0}{\delta t} + V_{mach},$$

где $|V_f^{(i)}|$ – модуль скорости движения i -ого фронта, N – число одновременно движущихся фронтов, l_0 – первоначальная длина рабочей части образца, δt – продолжительность площадки текучести, V_{mach} – скорость захвата. В этом отношении поведение фронтов фазового перехода полностью аналогично кинетике фронтов полос Чернова – Людерса (ПЧЛ) в низкоуглеродистой стали и может быть представлено в виде автоволны переключения локализованной деформации [1]. Основное различие между этими явлениями состоит в том, что степень локализации деформации на фронте фазового превращения на порядок меньше, чем на фронте ПЧЛ, что, не позволило использовать технику цифровой статистической спекл-фотографии, имеющую гораздо более высокое пространственное разрешение [2]. Поэтому, в частности, не удалось описать процесс зарождения полос деформационного фазового превращения. Кроме того, было обнаружено, что фронт фазового превращения имеет более сложную структуру, чем фронт ПЧЛ. На нем происходят изменения всех трех компонент тензора дисторсии: локальное удлинение, локальный сдвиг и локальный поворот.

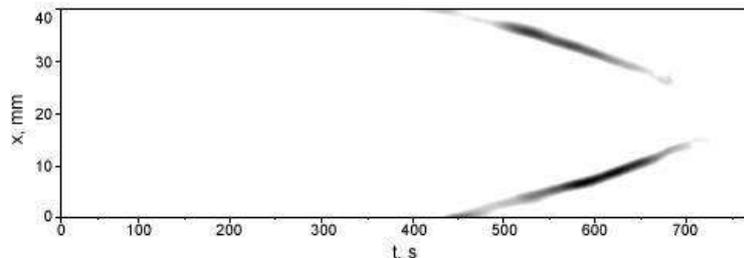


Рис. 3. Хронограмма фронтов фазового превращения при разгрузке

Важные результаты получены в процессе разгрузки образца (рис. 1). Хотя полного восстановления размеров и формы образца не происходит, и горизонтальная полка на кривой разгрузки не наблюдается, образуются подвижные фронты обратного превращения $B19' \rightarrow B2$ (рис.3). Они также зарождаются на границах рабочей части образца, движутся навстречу друг другу, то есть представляют собой автоволну переключения. Скорости фронтов обратного превращения больше скоростей фронтов прямого превращения, а сами фронты сильно размытые и характеризуются более низкими амплитудами. Следует отметить, что аннигиляция фронтов обратного превращения не происходит, поэтому часть образца в промежутке 19 – 25 мм остается в мартенситном состоянии, и как следствие, размеры и форма полностью не восстанавливаются.

Таким образом, и прямое, и обратное деформационное превращение в сверхэластичном никелиде титана реализуются путем формирования и распространения автоволн переключения локализованной пластической деформации.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.1.2

1. Gorbatenko V.V., Danilov V.I., Zuev L.B. Plastic flow instability: Chernov–Lüders bands and the Portevin—Le Chatelier effect // Technical Physics. 2017. Vol. 62, Issue 3. P. 395-400.
2. Zuev L.B., Gorbatenko V.V., Pavlichev K.V. Elaboration of speckle photography techniques for plastic flow analyses // Measur. Sci. Technol. 2010. Vol. 21. 054014.

DOI: 10.17223/9785946218412/36

**ВЛИЯНИЕ ЧАСТИЦ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА МЕХАНИЗМЫ ПЛАСТИЧЕСКОЙ
ДЕФОРМАЦИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ**

Киреева И.В., Чумляков Ю.И., Победенная З.В., Выродова А.В.,
Куксгаузен И.В., Поклонов В.В. Куксгаузен Д.А.

*Сибирский физико-технический институт Национального исследовательского
Томского государственного университета, Томск, Россия
kireeva@spti.tsu.ru*

На монокристаллах ГЦК $\text{CoCrFeNiAl}_{0.3}$ и CoCrFeMnNi высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) при деформации растяжением исследовано влияние частиц и температуры испытания на механическое поведение и механизм деформации – скольжение/двойникование.

1. Экспериментально установлено, что старение при 823К в течение 150 часов и 893К в течение 50 часов приводит к выделению частиц γ' -фазы размером $d < 3$ нм в монокристаллах ГЦК $\text{CoCrFeNiAl}_{0.3}$ с величиной энергии дефекта упаковки $\gamma_0 = 0.051$ Дж/м². На монокристаллах ГЦК $\text{CoCrFeNiAl}_{0.3}$, ориентированных вдоль $[\bar{1}11]$ направления, показано, что при деформации растяжением выделение частиц γ' -фазы приводит к повышению напряжений на пределе текучести на 90-100 МПа в широком температурном интервале $T = 77-873$ К относительно исходных кристаллов без частиц. Основным механизмом деформации $[\bar{1}11]$ кристаллов $\text{CoCrFeNiAl}_{0.3}$ ВЭС с частицами γ' -фазы, определяющим их механическое поведение, является скольжение, поскольку двойникование обнаруживается только при 77К после 20% деформации. В дислокационной структуре при выделении частиц γ' -фазы наблюдаются мощные плоские скопления дислокаций, свидетельствующие о локализации деформации преимущественно в одной системе, не смотря на тот факт, что $[\bar{1}11]$ -кристаллы ориентированы для множественного сдвига. Физическая причина локализации деформации в кристаллах $[\bar{1}11]$ ориентации обусловлена срезанием частиц γ' -фазы скользящими дислокациями и разрушением ближнего порядка в матрице. Локализация деформации сопровождается уменьшением коэффициента деформационного упрочнения $\Theta_{II} = d\sigma/d\varepsilon$ на стадии линейного упрочнения и увеличением пластичности по сравнению с этими кристаллами без частиц.

2. В монокристаллах CoCrFeMnNi ВЭС с $\gamma_0 = 0.019-0.022$ Дж/м² механическое поведение обусловлено взаимодействием скольжения с двойникованием и двойникования с двойникованием. Установлено, что при 296К двойникование, которое в $[\bar{1}11]$ и $[\bar{1}44]$ кристаллах развивается после небольшой деформации 5-10% одновременно со скольжением не играет определяющей роли в упрочнении. При 77К за счет сильной температурной зависимости $\tau_{кр}^{СК}(77К)/\tau_{кр}^{СК}(296К) = 1.8-1.95$ и уменьшения γ_0 с понижением температуры испытания двойникование в монокристаллах CoCrFeMnNi ВЭС является конкурирующим со скольжением механизмом деформации. Показано, что при 77К стадийность кривых течения, протяженность стадии линейного упрочнения и $\Theta_{II} = d\sigma/d\varepsilon$ на этой стадии определяются числом развивающихся систем двойникования. При развитии двойникования преимущественно в одной системе одновременно со скольжением деформационное упрочнение оказывается значительно меньше, чем при развитии двойникования одновременно в нескольких системах. Максимальный эффект деформационного упрочнения при развитии двойникования в двух системах наблюдается в $[\bar{1}11]$ - и $[\bar{1}44]$ -кристаллах. Установлено, что подавление процессов поперечного скольжения и образование шейки по условию Консидера при развитии двойникования в одной системе одновременно со скольжением увеличивает протяженность стадии линейного упрочнения и пластичность по сравнению с комнатной температурой испытания.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-19-00217

Долголетняя история научных исследований природы пластической деформации твердых тел не привела к полному пониманию этой проблемы, но выяснила ограниченность существующих механического и физического подходов к ней. Так механика пластичности характеризуется многообразием используемых макромасштабных моделей, часто существенно упрощенных. Они часто имеют лишь прагматическое обоснование и ориентированы на решение частных задач пластической деформации. В рамках таких подходов удастся достичь практических целей, но для понимания природы феномена пластичности их явно недостаточно.

Физические (дислокационные) модели пластичности в своем большинстве базируются на электронно-микроскопическом анализе малых объемов деформируемого кристалла $\sim 10^{-10}$ м³. Получаемые в таких случаях микроструктурные данные по умолчанию экстраполируются на макроскопический объем, что, вообще говоря, не всегда обосновано.

В 1987 году Зегер и Франк [1] предложили рассматривать пластическую деформацию как образование структуры, заявив: «Мы можем ... утверждать, что применение термодинамики необратимых процессов в открытых системах к проблеме образования структур при пластической деформации кристаллических материалов вполне успешно на качественном уровне». Это открыло путь к применению в физике пластичности методов синергетики [2].

Для использования синергетических принципов в построении моделей пластического течения следует учесть свойства среды, лишь в малой степени учитываемые в дислокационных моделях. Главными из них являются: *нелинейность, неравновесность и активность*. Кроме того, пластичность является *необратимым* явлением. Переходя к синергетике пластической деформации, следует понять, что в деформируемой среде может образовываться упорядоченную структуру. Ответом на это вопрос могут служить представления о локализации пластической деформации, которая начинается локализованным образом (полосы Людерса) и заканчивается формированием шейки разрушения.

Высказанная гипотеза об общем характере локализации пластического течения нашла свое экспериментальное подтверждение во многих экспериментальных работах, выполненных с использованием различных методик. Это позволило предложить новый способ описания пластичности, фактически переводящий рассмотрение проблемы на язык геометрии. В этом случае объектом исследований служит закономерная картина локализации пластического течения в деформируемом образце, определяемая законами деформационного упрочнения [3].

Основные положения развиваемой теории пластичности состоят в следующем:

1. Наблюдаемая картина локализации (паттерн локализованной пластичности) является сечением объемной автоволны локализованной пластичности поверхностью образца.

2. Локализация пластического течения принимает формы небольшого числа автоволновых мод, тип которых однозначно связан с действующим на данной стадии законом деформационного упрочнения.

3. Пластическая деформация рассматривается как процесс возникновения и эволюции порядка в деформируемой среде.

При анализе экспериментальных данных о развитии автоволн локализованной пластичности, полученных в экспериментах на металлах и сплавах, щелочно-галоидных кристаллах, керамике и горных породах, предложена модель развития локализованного пластического течения, основанная на расслоении деформируемой среды на динамическую (деформационную) и акустическую (сигнальную) подсистемы. Взаимодействие между ними вызывает релаксацию и образование концентраторов напряжений, а каждый акт релаксации сопровождается акустической эмиссией. Приложение акустического импульса инициирует

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

акт деформации. Теоретические оценки возможностей такой модели доказывают ее применимость.

Как установлено экспериментально [3], каждой стадии деформационного упрочнения, наблюдающейся при пластическом течении, отвечает определенная мода автоволны локализованной пластичности. Таким образом, процесс пластического течения может рассматриваться как закономерная эволюция пространственно-временных автоволновых мод пластичности. В то же время, деформируемый образец служит универсальным генератором автоволновых процессов, для работы которого нет необходимости менять макроскопические условия процесса (размеры, температуру, скорость деформирования).

Пластическое течение в развиваемой модели описывается системой параболических реакционно-диффузионных уравнений и для деформаций (1) и напряжений (2)

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon} = f(\varepsilon) + D_{\varepsilon\varepsilon} \varepsilon'', & (1) \\ \dot{\sigma} = g(\sigma) + D_{\sigma\sigma} \sigma''. & (2) \end{cases}$$

Процесс деформирования в этом случае включает в себя *гидродинамическую* (функции $f(\varepsilon)$ и $g(\sigma)$) и *диффузионную* компоненты, по-разному зависящие от условий деформирования.

Основным уравнением разработанной модели является упругопластический инвариант деформации, связывающий длину и скорость распространения автоволн локализованной пластичности с межплоскостным расстоянием и скоростью поперечного звука. Фактически инвариант демонстрирует связь упругой и пластической деформаций в процессе формоизменения. Его величина, экспериментально установленная при исследовании пластического течения тридцати восьми различных материалов (металлы, щелочно-галоидные кристаллы, керамика, горные породы) подчиняется нормальному распределению и составляет

$$\left\langle \frac{\lambda V_{aw}}{\chi V_t} \right\rangle_{n=38} = \langle \hat{Z} \rangle = 0,49 \pm 0,04 \approx \frac{1}{2}. \quad (3)$$

Важная роль упругопластического инварианта (3) определяется тем, что он имеет ряд следствий, которые описывают многие закономерности процесса пластической деформации. Все эти следствия имеют экспериментальную проверку. Наиболее важными из них являются:

1. Зависимость скорости распространения от коэффициента деформационного упрочнения вида $V_{aw} \sim \theta^{-1}$ указывающая на отличие автоволн пластичности от волн пластической деформации Кольского.

2. Квадратичный закон дисперсии автоволн локализованной пластичности $\omega = 1 + k^2$, указывающий на нелинейность феномена пластического течения

3. Зависимость длины автоволны от размера зерна типа функции Ферхюльста, объясняющая вклад структуры материала в автоволновую пластичность.

4. Соотношения между решеточным, дислокационным и макроскопическим масштабами деформационных процессов.

5. Связь автоволновой теории пластичности и теории дислокаций.

Развиваемая автоволновая модель пластической деформации описывает пластическую деформацию таких разных классов материалов, как металлы, щелочно-галоидные кристаллы и горные породы. Кроме того, удалось установить определенные корреляции между пластичностью металлов и их положением в Периодической таблице элементов Д.И. Менделеева.

1. Seeger A., Frank W. In: Non Linear Phenomena in Materials Science. Trans. Tech. Publ. N.Y.: 1988. P. 125-137.
2. Олемской А.И., Кацнельсон А.А. Синергетика конденсированной среды. М.: УРСС, 2003. 335 с.
3. Зув Л.Б. Автоволновая пластичность. Локализация и коллективные моды. М.: Физматлит, 2018. 207 с.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-19-10025-П.

DOI: 10.17223/9785946218412/38

**КОРРЕЛЯЦИИ ХАРАКТЕРИСТИК АВТОВОЛН ЛОКАЛИЗОВАННОЙ
ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ МЕТАЛЛОВ И ПАРАМЕТРОВ МЕЖАТОМНЫХ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ**

Зуев Л.Б., Баранникова С.А., Жармухамбетова А.М.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Экспериментальное исследование кинетики развития макроскопически локализованной пластичности, проведенное для девятнадцати различных металлов (Mg, Al, Ni, V, α -Fe, γ -Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Zr, Nb, Mo, Cd, In, Sn, Hf, Ta, Pb) [1], показало, что на стадиях линейного деформационного упрочнения в них формируется фазовая автоволна локализованной пластичности. При этом удобной характеристикой процесса распространения такой автоволны является произведение ее длины λ на постоянную для заданных условий нагружения скорость распространения V_{aw} . Обе эти характеристики с достаточной точностью определяются с помощью $X - t$ диаграмм. В настоящей работе оказалось, что произведение λV_{aw} линейно растет с ростом параметра Дебая [2] (дебаевской температуры) T_D , нормированной на температуру T^* , определяемую как:

$$T^* = E_b/k_b \quad (1)$$

где k_b – постоянная Больцмана. Энергия связи E_b для исследованных элементов была взята из справочника [3]. Попытки использовать вместо энергии E_b другие характерные для твердых тел значения энергии, например, теплоту плавления, теплоту кипения или теплоту перехода «пар-жидкость» [3] показали существенно худшую корреляцию. Корреляционная зависимость $\lambda V_{aw} (T_D/T^*)$ выполняется для металлов, относящихся к 3-му, 4-му, 5-му и 6-му периодам Периодической системы элементов.

Анализ полученных данных позволил установить, что в пределах $12_{(Mg)} \leq Z \leq 82_{(Pb)}$ (Z – атомный номер элемента) параметр пластичности λV_{aw} осциллирует относительно среднего значения. Как показал анализ литературы, эти осцилляции соответствуют аналогичным закономерностям поведения ряда независимо определенных решеточных характеристик, таких, например, как температура Дебая θ_D [2], энергия связи E_b [3], плотность, температура плавления, упругие модули, работа выхода электрона и другие, при росте Z [3]. Такое соответствие продемонстрировано симбатным периодическим поведением зависимостей λV_{aw} и размера ячейки Вигнера-Зейтца [3] от атомного номера.

Впервые установлены линейные зависимости параметра пластичности от радиуса ячейки Вигнера-Зейтца, энергии связи, объема на атом, объемного упругого модуля.

Таким образом, экспериментально установленная зависимость $\lambda V_{aw} (T_D/T^*)$ и анализ указывают на взаимную обусловленность кинетической характеристики макроскопического процесса развития локализованной пластической деформации λV_{aw} и величин, характеризующих свойства кристаллической решетки деформируемого вещества. Как известно [2], параметр Дебая характеризует энергию колебаний кристаллической решетки твердого тела. Кроме того, величины, входящие в параметр T^* , также связаны с типичными решеточными свойствами деформируемой среды.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Зуев Л.Б. Автоволновая пластичность. Локализация и коллективные моды // Л.Б. Зуев. – М.: Физмалит, 2018. – 207 с.
2. Крэкнелл А. Поверхность Ферми // А. Крэкнелл, Н. Уонг. – М.: Мир, 1978. – 350 с.
3. Физико-химические свойства элементов. Справочник / Под ред. Г.В. Самсонова. – Киев: Наукова думка, 1965. – 807 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/39

**ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ ЧАСТИЦ
АЛЮМИНИЯ В ПЛАНЕТАРНОЙ МЕЛЬНИЦЕ**

Видюк Т.М., Чесноков А.Е., Смирнов А.В.

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, Новосибирск

Нанесение покрытий на механические детали методами газотермического и газодинамического напыления в настоящее время являются неотъемлемой частью автомобильной, авиационной, тяжелой, а также медицинской, биологической и других промышленности. Основная задача покрытий заключается в увеличении срока эксплуатации деталей и функциональных узлов различной техники и оборудования при высоких механических нагрузках, температурах, химически агрессивных средах и других воздействиях. В процессе напыления влияние на формирование внутренней структуры покрытия оказывают основные физические параметры, такие как скорость, температура, размер, форма и внутренняя структура частицы, температура подложки, материал и состояние поверхности [1]. Формирование покрытия происходит последовательно вследствие соударения с подложкой отдельных частиц - сплэтов - основных элементарных объемов структуры покрытия. Для газотермических методов напыления характерен нагрев до и выше температуры плавления материала частиц. Особенностью холодного газодинамического напыления является возможность наносить покрытия частицами без существенного нагрева, что позволяет получать покрытия со свойствами, близкими к свойствам материала напыляемых частиц [2]. Как правило, предварительное высокоэнергетическое воздействие на исходный материал приводит к изменению структуры частиц. Например, механическая обработка порошков в планетарной мельнице приводит к накоплению энергии деформации по всему объему, появлению точечных и линейных дефектов в кристаллической решетке; очищению их поверхности вследствие разрушения оксидных пленок и адсорбированных слоев, которые являются диффузионным барьером для начала химического взаимодействия реагентов; химических превращений и т.д. [3]. Следовательно, характеристики покрытий, напыленных из механически обработанных частиц, будут отличаться от значений физических, химических и механических параметров покрытий, полученных при напылении исходных порошков.

Целью работы является экспериментальное исследование влияния механической обработки порошка алюминия в планетарной мельнице в зависимости от времени.

Для выполнения работы были решены следующие задачи:

1. механическая обработка порошка в течение 15, 30, 45, 60 и 90 секунд, при постоянном отношении массы загружаемых шаров к обрабатываемому материалу и ускорению мелющих тел;
2. определен гранулометрический состав и удельная поверхность, исследована морфология поверхности и внутренняя структура механически обработанных и исходных частиц.

После механической обработки порошок был разделен на две фракции с размерами меньше и больше 90 мкм. Разделение частиц на две фракции обусловлено тем, что частицы основной фракции с размерами меньше 90 мкм имеют широкое применение, в частности, в газотермическом, детонационном и холодном газодинамическом напылении. Частицы размерами больше 90 мкм формой в виде деформированного диска могут быть обработаны в плазменной струе, результатом которой будет порошок, состоящий из микронного и декамикронного размера частиц сферической формы. Такие частицы в настоящее время востребованы аддитивными технологиями, лазерной наплавкой и в других отраслях порошковой металлургии. Увеличение времени механической обработки приводит к уменьшению массовой доли частиц фракции меньше 90 мкм. При взаимодействии мелющего тела с частицей кинетическая энергия расходуется на пластическую деформацию частицы с выделением большого количества тепла, вплоть до 95% [4]. При увеличении времени

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

механической обработки возрастает количество введенной энергии в материал, что приводит к увеличению теплоты, выделяемой во время деформации частиц, которая не успевает рассеяться, вследствие чего происходит стремительный рост температуры всей системы, приводящий к нагреву материала до температуры, близкой к температуре плавления или к его плавлению [5]. Частицы, имеющие температуру, близкую к температуре плавления материала, являются пластичными, легко взаимодействуют друг с другом; происходит увеличение их размеров вследствие процесса гранулирования методом окатывания. Плавление алюминиевых частиц наблюдается при механической обработке в течение 120 секунд. Результаты исследования гранулометрического состава показывают, что наблюдается увеличение среднего размера частиц при механической обработке, которое характеризует зарождение и образование агломератов, состоящих из ультрадисперсных частиц алюминия слоистой структурой.

В работе проведено экспериментальное исследование влияния времени механической обработки на гранулометрический состав и внутреннюю структуру алюминиевых частиц. Показано, что увеличение времени механической обработки приводит к росту температуры всей системы (шар - частица), вследствие чего наблюдается процесс гранулирования методом окатывания. Увеличивается массовая доля частиц размером больше 90 мкм. При механической обработке в течение 120 секунд обрабатываемый материал достигает температуры плавления.

Работа частично выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы No. АААА-А17-117030610124-0.

1. Influence of Powder Porous Structure on the Deposition Behavior of Cold-Sprayed WC-12Co Coatings, Pei-Hu Gao, Yi-Gong Li, Chang-Jiu Li, Guan-Jun Yang, and Cheng-Xin Li, JTTEE5 17:742–749, DOI: 10.1007/s11666-008-9258-1
2. А. Alkhimov, V. Kosarev, A. Papyrin, Cold Spray Technology. Experimental study of the deposition process. // Applied mechanics and technical physics, 1998. – V. 39. – № 2. – P. 182–188. (in Russian)
3. Е. Avvakumov, Mechanical methods of activation of chemical processes. – Novosibirsk: Nauka, 1988. – 305 p. (in Russian)
4. Taylor G. I. The mechanism of plastic deformation of crystals. – Proc. Roy. Soc., 1934, v. A145, p. 362–404. <https://doi.org/10.1098/rspa.1934.0106>
5. F. P. Bowden, P. H. Thomas. The surface temperature of sliding solids — Proc. Roy. Soc., 1954. a. A223, p. 29—40. <https://doi.org/10.1098/rspa.1954.0098>

DOI: 10.17223/9785946218412/40

**ПРОИСХОЖДЕНИЕ МНОГОУРОВНЕВЫХ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ
СТРУКТУР В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ПРИ ДЕФОРМАЦИИ**

¹Хон Ю.А., ²Zapolsky H., ¹Каминский П.П.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Rouen university, Rouen, France

Структурные изменения в твердых телах при пластической деформации проявляются на различных масштабах наблюдения и определяют функциональные свойства материалов. Этот экспериментальный факт привел к формированию представлений о материалах как многоуровневых системах с иерархически организованной структурой. Тип образующихся структур и характерные масштабы их формирования зависят от степени и скорости деформации, температуры, исходного состояния материала. Происхождение многоуровневых структур до сих пор остается загадочным. Чаще всего, дело ограничивается либо словесными моделями, либо моделями, основанными на рассмотрении движения известных носителей пластической деформации и пр. Кстати, на вопрос о зарождении самих носителей пластической деформации до сих пор удовлетворительного физически обоснованного ответа не получено.

В докладе рассматриваются физические причины имеющихся трудностей, предложены модели и механизмы формирования многоуровневых структур. Показано, что основной причиной имеющихся трудностей при построении моделей формирования многоуровневых систем является неявное использование адиабатического приближения. Это приближение и основанные на нем методы расчета и анализа структурных изменений в твердых телах применимы, строго говоря, для изолированных систем. Обращено внимание на то, что система ядер и электронов при деформации является открытой системой, и динамика атомов в таких системах является неадиабатической. В открытой системе при достижении пороговых значений управляющих параметров (величина деформации, разность температур и пр.) имеется еще неустойчивость – динамическая неустойчивость, определяемая изменениями в электронной подсистеме. Развитие динамической неустойчивости инициирует неустойчивость, определяемую возбуждением неустойчивой фононной моды с медленно меняющейся в пространстве и времени амплитудой. Масштабы структурных изменений в среде определяются волновыми векторами неустойчивых фононных мод. Развитие неустойчивостей в открытой системе является механизмов формирования крупномасштабных локализованных структур, отражающих структурные изменения в твердом теле при пластической деформации.

Получена система уравнений, описывающая медленную динамику неустойчивых фононных мод и моды, определяемую динамическими смещениями атомов в открытой системе. Параметры полученных уравнений определяются структурным состоянием среды, сформировавшимся на предыдущей стадии деформации и условиями деформации. На основе анализа уравнений показано, что в зависимости от исходного состояния деформируемой среды развитие неустойчивостей в твердом теле может проявляться *in situ* в виде распространения одного либо нескольких фронтов локализованной пластической деформации, неподвижных полос локализованной деформации, одной полосы локализованной деформации. Движущиеся фронты наблюдаются экспериментально на стадиях легкого и линейного упрочнения, неподвижные полосы локализованной деформации на стадии параболического упрочнения. В двумерном случае при деформации формируются структуры в виде спиралей. Обсужден вопрос о зарождении дислокаций и микротрещин в кристаллах при реальном уровне приложенных напряжений. Рассмотрено влияние температуры и скорости деформации на особенности структурных превращений в твердых телах при деформации.

DOI: 10.17223/9785946218412/41

**TRANSFORMATIONS OF KIMBERLITE MINERALS AND NATURAL DIAMONDS
STRUCTURE AS THE RESULT OF PULSED ELECTROMAGNETIC IRRADIATION**

Anashkina N.E., Bunin I.Zh.

Federal state budgetary institution «N.V. Mel'nikov Institute of Comprehensive Exploitation of Mineral Resources RAS», Russia, Moscow

The current technology for mining and processing diamonds from primary deposits in Russia damages the diamond crystals at a rate of 25–75%, leading to an average weight loss of 12% (Chanturiya, Goryachev, 2008). Diamonds are usually damaged during the autogeneous grinding of kimberlites, and up to 29% of all diamonds disintegrate. Therefore, in processing of diamond-bearing kimberlites the actual problem of prime importance is development of new effective processes feasible to provide a higher grade concentrates due to softening of kimberlite, to preserve diamond crystal safety in autogenous ore grinding circuits. The efficiency of enriching diamond-bearing ores can be improved by developing and introducing new energy-saving methods aimed at increasing the quality of concentrates via kimberlite softening, the selective identification and withdrawal of diamond crystals in milling ores, and finding new distinctions and enhancing the contrast between the properties of diamonds and other rock-forming minerals. One of such methods is high-voltage nanosecond pulses (HPEMP).

The studies were conducted on crystals of natural diamonds with a grain size of -2...+1 mm from the Triassic placer of the Bulkur site in the Nizhne-Lenski District, minerals specimens ground down to -100 + 63 μm, and polished sections 1 × 1 × 0.45 cm in size. Samples were conducted with nanosecond high-voltage video pulses (τ (pulse front), ~1–5 ns; τ (pulse duration), ~50 ns; U (pulse amplitude), ~25 kV; E ~ 107 V m⁻¹; pulse repetition frequency, 100 Hz, pulse energy, ~0.1 J; duration t_{treat} of electric pulse treatment, 10–150 s; HPEMP number N_{pulse} ~ (1 – 15) × 10³). The phase and structural impurities were examined using IR Fourier spectroscopy (FTIR). Changes in the morphological properties of mineral surfaces were examined by analytical electron, and optical microscopy. The microhardness of kimberlite rock-forming minerals in the initial state and after HPEMP treatment was measured using Vickers method (HV, MPa).

Figure 1 presents the relationships (histograms) between relative variations in microhardness of minerals under HPEMP-irradiation versus the pulsed treatment time: $\Delta HV_i / HV_{0i}$, % , where HV_{0i} is the microhardness of its specimen in initial state; HV_i is the microhardness of its specimen after electric pulse treatment, and indenter morphology on the surface of minerals. The experimental data obtained show the softening of rock-forming mineral-dielectrics under high-voltage nanosecond electromagnetic pulse irradiation. Microhardness variations for rock-forming minerals correspond to the results of our spectroscopic investigations (Bunin et.al., 2015).

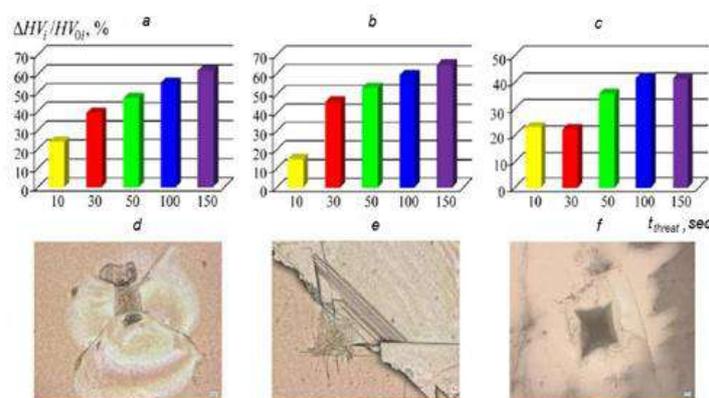


Fig. 1. The relative change in microhardness ($\Delta HV_i / HV_{0i}$ %) of olivine (a), calcite (b), serpentine (c) versus time (t^{treat}) of processing; indenter morphology (Vickers diamond pyramid) on the surface of minerals (d) - (f); LCSM, width of scanning window ~ 100 μm

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

A gradual process of mineral selective disintegration was the main mechanism behind the dissipation of energy in a high-voltage pulse electric field: the opening (loosening) of intercrystalline boundaries, the formation and propagation of cracks along the cleavage surfaces, and the formation of microcrystal fragments upon extending the pulse action to $t_{\text{treat}} \geq 50$ s.

At the same time, nonthermal HPEMP treatment didn't produce micro flaws and micro cracks in diamonds (this was monitored by microscopy diagnostics), because the breakdown voltage of an electric field is about 10^9 V m⁻¹ for diamonds, that two orders higher than strength of electric field component E in the interelectrode space of the pulse generator (Khmelnitskii, 2015).

Based on FTIR, there was no deep structural rearrangement of the diamond crystals under the influence of electromagnetic pulses, but the absorption coefficient of the line ~ 1365 cm⁻¹ grew consistently, which indicated an increase in the concentration of platelet defects B2 (platelets) (Fig. 2), represented by interstitial carbon atoms. It is characteristic that all these crystals belong to the group with moderate nitrogen content and a higher than normal degree of nitrogen aggregation %N(B). As a result of the study of microhardness of diamond crystals exposed to deformation in a natural setting, in (Naletov et.al., 1979) it was found that B-centers increase the dispersion strength of natural diamonds compared to the original state by a factor of 1,7.

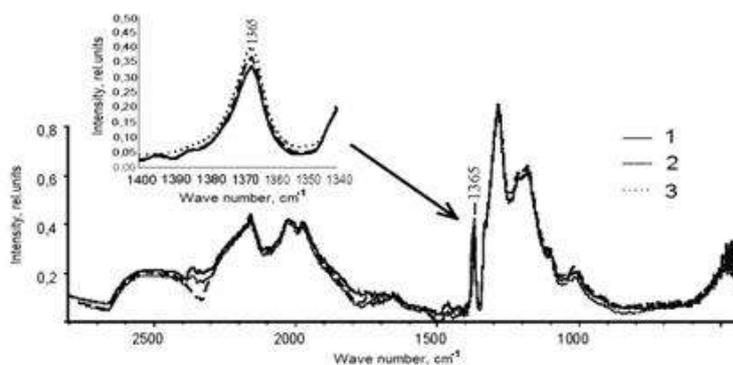


Fig. 2. Spectrum of diamond before and after treatment: 1- without treatment, 2 – 50 sec, 3 – 150 sec.

Conclusions

The effect of multidirectional change in mechanical properties (microhardness) of rock-forming minerals of kimberlite (olivine, serpentine, calcite) and diamond crystals under conditions of nanosecond HPEMP was established. It consists in surface layer softening of rock minerals and reduce of their microhardness as a whole by 40-60% due to the formation of structural defects and the simultaneous increase in B2-defects (platelets) concentration in the crystal structure of diamonds, which, presumably, causes an increase in the strength properties of diamond crystals. The obtained result indicates the possibility of applying of pulsed energy impact to improve the softening efficiency of rock-forming minerals of diamond-bearing kimberlites without damaging diamond crystals and ensuring their preservation by the subsequent grinding of ores.

1. Chanturiya, V.A., Goryachev, B.E. Modern Technologies of Complex Processing of Min and Raw Materials // Ed., Moscow: Ruda i Metally. 2008. p. 151.
2. Khmelnitskii, R.A. Prospects for the synthesis of large single-crystal diamonds // Phys.-Usp. 2015. v. 58. no. 2. p. 134.
3. Naletov, A. M., Kljuev, Ju. A., Grigor'ev, O. N., Mil'man, Ju.V., Trefilov, V.I. Vlijanie opticheski aktivnyh centrov na prochnostnye svojstva almaza // Dokl AN SSSR. 1979. №7. p.83-86.

**ПРОЧНОСТЬ ТЕКСТИЛЬНЫХ НИТЕЙ
С УЧЕТОМ ИХ ИЕРАРХИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ**

¹Султанов К.С., ¹Исмоилова С.И., ²Туланов Ш.Э.

¹*Институт механики и сейсмостойкости сооружений Академии наук
Республики Узбекистан, Ташкент*

²*Ташкентский институт текстильной и легкой промышленности, Ташкент*

Проблема обрывности текстильных нитей в технологических процессах ткачества и прядения до сих пор окончательно не решена. С увеличением скоростей в технологических процессах эта проблема еще больше приобретает актуальность [1]. Среди текстильных нитей особое место занимают хлопковые нити, т.е. хлопчатобумажные пряжи, которые искусственно изготавливаются из хлопковых волокон длиной 0,015-0,045 м и толщиной – $(0,133-0,233) \cdot 10^{-3}$ м.

Известно, что хлопчатобумажные пряжи (далее по тексту пряжа) имеют сложную многоуровневую иерархическую структуру [2]. Эта структура состоит из нано (молекулярный), микро (фибриллы), мезо (волокна), макро (пряжа) уровней. С учетом структуры на мезоуровне, т.е. особенностей расположения волокон в пряже, силы трения между волокнами, длины хлопкового волокна, параметров и показателей технологических процессов прядения и геометрических особенностей пряжи на макроуровне многими авторами предложены эмпирико-теоретические методы определения, оценки и прогноза прочности пряж. Очевидно, прочность пряж зависит от технологии ее изготовления. На основе этих методов были предложены технологические решения, приводящие к улучшению прочности пряж. В настоящее время это направление практически исчерпало свои возможности, и прочность пряж достигла своих предельных значений при существующих технологиях ее изготовления.

Дальнейшие пути в этом направлении, привели к решению проблемы повышения прочности пряжи на стыке наук текстильного материаловедения и механики деформируемого твердого тела. Исходя из этого, были проведены серии экспериментов по растяжению пряж до обрыва, получены зависимости $F(\varepsilon)$ (F – продольная растягивающая сила, в Н, ε – продольная относительная деформация, в %) для 45-ти разновидностей пряж с различными фактическими линейными плотностями (по весу) T , от $T = 14,56$ текс до $162,13$ текс (1 текс = 10^{-5} Н/м), изготовленных пневмомеханическим способом прядения из средневолокнистого хлопка 1-го сорта, 1-ой группы зрелости, 4-го типа волокна по девяти заданным номинальным линейным плотностям: $T = 14,0$; $15,4$; $16,5$; $18,5$; $29,0$; $50,0$; $72,0$; $100,0$ и $160,0$ текс.

Испытания пряж на растяжение проведены на разрывной установке «Statimat C», оснащенной собственным компьютером и программой управления экспериментом. Растяжение производится на базе длиной $l_0 = 0,5$ м.

На рис.1 приведены диаграммы $F(\varepsilon)$, полученные при растяжении пряжи с линейной плотностью $T = 29,10$ текс. Повторность опытов 50 кратная. Установка «Statimat C» производит растяжение последовательно 50 раз в автоматическом режиме (количество растяжений задается в программу), также задается предварительное незначительное натяжение пряжи перед растяжением.

В общем, растяжение пряжи происходит нелинейно (рис.1). После достижения деформацией растяжения в среднем $\varepsilon = 6-7\%$, пряжа обрывается, и растягивающее усилие падает до нуля.

При растяжении пряжи, на мезоуровне происходит сложное структурное изменение. Хлопковые волокна, из которых состоит пряжа, начинают смещаться относительно друг-друга и при этом изменяются геометрические, физические и механические свойства пряжи. В процессе растяжения до обрыва, пряжа испытывает и упругие и пластические стадии деформирования. Из зависимости $F(\varepsilon)$ (рис.1) невозможно определить границы упругих и

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

пластических стадий деформации пряжи, исходя из этого, модуль упругости и модуль пластичности назовем и модулем деформации.

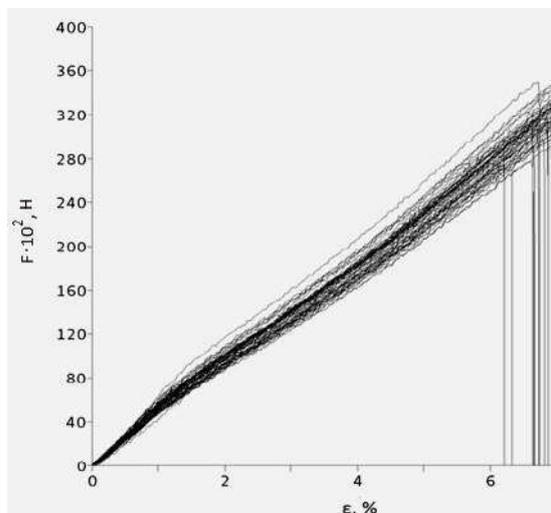


Рис.1. Диаграмма растяжения пряжи до обрыва

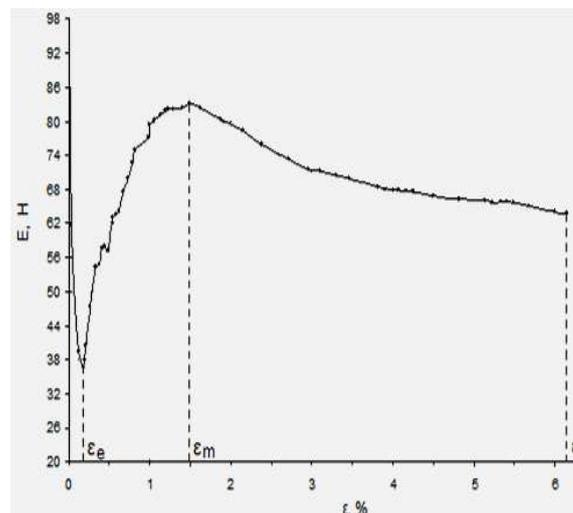


Рис.2. Изменение модуля деформации при растяжении пряжи до обрыва

Изменение секущего модуля деформации в процессе растяжения, для осредненной зависимости $F(\varepsilon)$ приведены на рис.2. как видно из рис.2, секущий модуль деформации E при растяжении пряжи изменяется сложным нелинейным образом. Зависимость $F(\varepsilon)$ позволяет предположить, что на участке $[0, \varepsilon_e]$ пряжа деформируется упруго, на участке $[\varepsilon_e, \varepsilon_m]$ – упруго-пластически, а на участке $[\varepsilon_m, \varepsilon_k]$ – пластически. При $\varepsilon = \varepsilon_k$ пряжа обрывается. Численно-аналитическая аппроксимация функции $E(\varepsilon)$ приводит к разработке физически нелинейной модели деформирования пряжи при растяжении до обрыва, которая может более точно прогнозировать прочность пряжи при различных скоростях растяжения. Однако, модельное представление процесса деформирования пряжи, даже с учетом переменности ее модуля деформирования, не приводит к новым технологиям получения более прочных пряж, приводящих к меньшему количеству обрыва в производстве.

Для получения новых технологий производства пряж, необходимо исследовать процесс деформирования пряжи при растяжении, на основе методов мезомеханики материалов [3-5]. Определение закономерностей деформирования пряжи на мезоуровне, покажет пути дальнейшего повышения прочности пряжи в технологических процессах ее изготовления.

1. Seyam A-F. M., Lee J.H., Hondge G., Oxenham W., Grant E. Warp Break Detection in Jacquard Weaving Using Micro-Electro-Mechanical Systems: Effect of Yarn Type//Textile Research Journal. 2008, Vol.78. №8. P.664-670.
2. Morton W.E., Hearle J.W.S. Physical properties of textile fibers. Fourth edition. Cambridge: Woodhead Publishing Limited, 2008. P.765.
3. Панин В.Е., Клименов В.А., Псахье С.Г. и др. Новые материалы и технологии. Конструирование новых материалов и упрочняющих технологий. Новосибирск: ВО «Наука», 1993. 152 с.
4. Панин В.Е. Основы физической мезомеханики//Физическая мезомеханика. 1998, №1. С.5-22.
5. Макаров П.В. Подход физической мезомеханики к моделированию процессов деформации и разрушения//Физическая мезомеханика. 1998, №1. С.61-81.

DOI: 10.17223/9785946218412/43

**ВЛИЯНИЕ ЦИКЛИЧЕСКОГО НАГРУЖЕНИЯ НА СТРУКТУРУ И
МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОНСТРУКЦИОННОЙ СТАЛИ**

¹Надежкин М.В., ^{1,2}Зуев Л.Б., ^{1,3}Шляхова Г.В., ¹Бочкарёва А.В., ¹Полякова Е.С.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский Государственный университет, Томск*

³*Северский технологический институт – филиал НИЯУ МИФИ, Северск*

Типичной целью испытаний на усталость является определение количества циклов, необходимых для разрушения образца при заданных условиях. Широкое использование в машиностроении стали 45 обусловлено оптимальным соотношением прочности, износостойкости, а также экономической эффективности использования данной стали при изготовлении различных узлов машин и механизмов, подверженных влиянию знакопеременных нагрузок. Установлено, что при эксплуатации оборудования и изделий машиностроения разрушение большого числа объектов происходит при нагрузках ниже предела текучести, так как работа деталей и узлов в присутствии знакопеременных нагрузок приводит к изменению структуры металла, появляются микроскопические нарушения сплошности, которые впоследствии могут увеличиться в размерах и перерасти в очаг разрушения. В данной работе проведены экспериментальные исследования влияния количества циклов знакопеременных нагрузок на структуру и механические свойства стали 45, широко используемую при изготовлении многоступенчатых, шпинделей, кулачков, шестерней и др.

Механические испытания образцов с размером рабочей части 50×10×4 мм после воздействия знакопеременных нагрузок на сервогидравлической усталостной машине Biss UTM 150 с различным количеством циклов проводились методом одноосного растяжения. Исследования микроструктуры поверхности деформированных и недеформированных образцов проводили с использованием оптического и атомно-силового микроскопов.

Результаты механических испытаний показали, что уже $N = 5 \times 10^3$ циклов предел текучести стали увеличился на 100 МПа, однако при последующем увеличении количества циклов до $N = 100 \times 10^3$ изменений значения указанной величины не выявлено. Исследования образцов после усталостных нагрузок на АСМ позволили установить характерные особенности разрушения пластинчатого перлита. Было отмечено, что сначала процесс пластического течения происходит в ограниченном объеме - начинается в наиболее ослабленных местах субколоний перлита. С увеличением количества циклов нагружения процессы дробления цементитных пластин ускоряются и происходит разрушение перлита.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Государственной академии наук на 2017-2020 гг. и частично поддержана грантом РФФИ № 17-08-00751-а.

1. Шляхова Г.В., Баранникова С.А., Зуев Л.Б. Об использовании атомно-силовой микроскопии в металлографии//Деформация и разрушение материалов. – 2019. – № 1. – С. 32-36.

2. Shlyakhova G.V., Zuev L.B., Bockkareva A.V. Structure of carbon steel under plastic deformation// IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2018. – Vol. 447 (1). – P. 012064.

DOI: 10.17223/9785946218412/44

**КАЧЕСТВО ОБРАБОТКИ РЕЗАНИЕМ МЕДИ М1 В КРУПНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ
И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ СОСТОЯНИИ**

¹Филиппов А.В., ¹Шамарин Н.Н., ^{1,2}Тарасов С.Ю., ²Подгорных О.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский политехнический университет, Томск*

Формирование объемной ультрамелкозернистой структуры в материале способствует повышению его механических свойств. Измельчение структуры также используется с целью улучшения качества микроразмерных изделий, чье формообразование осуществляется методами обработки давлением.

Точение является одним из наиболее распространенных методов обработки материалов резанием, с целью формирования высокоточных и качественных изделий в разнообразных промышленных отраслях.

Медь является традиционным модельным материалом при изучении процессов пластической деформации металлов в условиях резания, поскольку является простым однофазным материалом.

Целью работы является исследование шероховатости поверхности, обработанных резанием (при точении) образцов, меди М1 с ультрамелкозернистой и крупнокристаллической структурой.

В данной работе осуществлялась обработка цилиндрических заготовок на токарном станке OKUMA ES-L8II-M. Обтачивалась торцевая поверхность заготовок с ультрамелкозернистой и крупнокристаллической структурой. В качестве варьируемых параметров процесса резания рассматривались скорость резания, подача и глубина резания. Использовался проходной резец со сменной многогранной пластиной фирмы Korloy, маркировка – CCGT 120408-AR. В процессе обработки использовалась водосмешиваемая смазочно-охлаждающая жидкость HOUGHTON DROMUS VX. Обрабатывались заготовки меди М1 с исходной КК структурой и образцы с УМЗ структурой, полученные методом равноканального углового прессования (РКУП). РКУП осуществлялся по схеме Вс с углом пересечения каналов 90° при скорости деформирования 6 мм/с. Температура прессования составляла 23°C. В процессе РКУП образцы были деформированы до различной степени деформации – 1, 4 и 12. Структурные исследования для образцов с УМЗ структурой выполнены методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) при помощи микроскопа JEM-2100 (JEOL Ltd, Japan). Оценка шероховатости поверхности после токарной обработки выполнена на лазерном сканирующем микроскопе Olympus OLS LEXT 4100 со специализированным программным обеспечением.

По данным просвечивающей электронной микроскопии размерность зеренно-субзеренной структуры составляет около 1-3 мкм после первого прохода РКУП. Увеличение степени деформации за счет дополнительных проходов РКУП приводит к дальнейшему уменьшению размерности структуры материала. После двенадцати проходов РКУП размерность зерен составляет ~ 100 нм.

В качестве исследуемых характеристик микрогеометрии обработанной поверхности рассматривались высотные и шаговые параметры шероховатости и волнистости. Анализ результатов лазерной сканирующей микроскопии указывает на существенное снижение высоты микронеровностей и уменьшение волнистости поверхности обработанного точением материала по мере измельчения его структуры. Таким образом, из полученных результатов следует, что формирование объемной ультрамелкозернистой структуры приводит к повышению качества обработки меди М1 при точении.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00058.

DOI: 10.17223/9785946218412/45

**ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОГО СОСТОЯНИЯ МЕДИ М1 НА МИКРОГЕОМЕТРИЮ
ПОВЕРХНОСТИ ПРИ ФРЕЗЕРОВАНИИ**

¹Филиппов А.В., ¹Шамарин Н.Н., ^{1,2}Тарасов С.Ю., ²Подгорных О.А.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский политехнический университет, Томск

Фрезерование характеризуется срезанием слоев материала малой толщины, что в случае с пластичными материалами может привести к снижению качества их обработки. Это снижение обусловлено адгезионным переносом и пластическим течением материала в области контакта инструмент-обработанная поверхность. В результате этих двух явлений нарушается структурная целостность поверхностного слоя и образуются участки локального увеличения высоты микронеровностей.

Формирование объемной ультрамелкозернистой структуры в ГЦК металлах приводит к снижению их пластичности в условиях квазистатических испытаний при комнатной температуре. Но с повышением температуры испытания пластичность резко увеличивается, по сравнению с крупнокристаллическим состоянием материала, что обусловлено известным эффектом сверхпластичности УМЗ материалов.

В условиях резания в зоне стружкообразования происходит существенный нагрев материала и, следовательно, также может проявляться эффект сверхпластичности при обработке материалов с УМЗ структурой. Однако, эта зона локализована в очень маленьком объеме и проявление сверхпластичности может оказаться несущественным в контексте его влияния на формирование микрогеометрии поверхности изделия. Следовательно, остается невыясненным вопрос о качестве фрезерования пластичных металлов с объемной ультрамелкозернистой структурой.

Целью данной работы является исследование качества обработки меди М1 с объемной ультрамелкозернистой структурой при фрезеровании с различной интенсивностью воздействия режущего инструмента.

Исследовались образцы в состоянии поставки и образцы после одного, четырех, восьми и двенадцати проходов РКУП. РКУП осуществлялось по схеме Вс со скоростью прессования 6 мм/с при температуре 23°C. Исследование микроструктуры проводилось методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) при помощи микроскопа JEM-2100 (JEOL Ltd, Japan), а также металлографии при помощи оптического микроскопа МЕТАМ ЛВ. При проведении ПЭМ исследований использовались режимы получения светлопольных изображений и микродифракционных картин (SAED). Тесты на сжатие и растяжение осуществлялись на испытательной машине Testsystems 110M-10 при комнатной температуре. Обработка образцов осуществлялась на фрезерном обрабатывающем центре DMC 635 V Ecoline. В качестве режущего инструмента использовались твердосплавные фрезы фирмы Corloy. Интенсивность режущего воздействия регулировалась путем варьирования частота вращения шпинделя, подачи и глубины резания. Оценка параметров рельефа обработанной резанием (при фрезеровании) поверхности проводилась с помощью конфокального лазерного сканирующего микроскопа Olympus OLS 4100.

В качестве исследуемых характеристик микрогеометрии обработанной поверхности рассматривались высотные и шаговые параметры шероховатости и волнистости. Полученные результаты свидетельствуют о том, что формирование объемной ультрамелкозернистой структуры приводит к повышению качества обработки меди М1 при фрезеровании.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00058.

DOI: 10.17223/9785946218412/46

**ПОВЫШЕНИЕ КАЧЕСТВА ТОЧЕНИЯ ЛАУНИ Л63 ПУТЕМ ФОРМИРОВАНИЯ
ОБЪЕМНОЙ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРЫ**

¹Филиппов А.В., ¹Шамарин Н.Н., ^{1,2}Тарасов С.Ю., ²Подгорных О.А.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский политехнический университет, Томск

Различия в механических свойствах, структуре и деформационном поведении материалов в условиях интенсивного термомеханического нагружения лезвийным инструментом оказывают существенное влияние на качество их обработки.

В ранее выполненных работах коллектив авторов установил, что формирование УМЗ структуры приводит к повышению качества обработки резанием сплавов АМг2, В95 и 12Х18Н10Т. В отличие от таких металлов как медь и алюминий, латунь Л63 склонна к деформации двойникованием.

Целью работы является исследование качества токарной обработки латуни Л63 с объемной ультрамелкозернистой и крупнокристаллической структурой.

В данной работе осуществлялась обработка цилиндрических заготовок на токарном станке OKUMA ES-L8II-M. Обтачивалась торцевая поверхность заготовок с ультрамелкозернистой и крупнокристаллической структурой. В качестве варьируемых параметров процесса резания рассматривались скорость резания, подача и глубина резания. Использовался проходной резец со сменной многогранной пластиной фирмы Korloy, маркировка – CCGT 120408-AR. В процессе обработки использовалась водосмешиваемая смазочно-охлаждающая жидкость HOUGHTON DROMUS VX. Обрабатывались заготовки латуни Л63 с исходной КК структурой и образцы с УМЗ структурой полученные методом равноканального углового прессования (РКУП). РКУП осуществлялся по схеме Вс с углом пересечения каналов 90° при скорости деформирования 6 мм/с. Температура прессования составляла 23°C. В процессе РКУП образцы были деформированы до различной степени деформации – 1, 2 и 3. Структурные исследования для образцов с УМЗ структурой выполнены методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) при помощи микроскопа JEM-2100 (JEOL Ltd, Japan). Оценка шероховатости поверхности после токарной обработки выполнена на лазерном сканирующем микроскопе Olympus OLS LEXT 4100 со специализированным программным обеспечением.

По данным просвечивающей электронной микроскопии размерность зеренно-субзеренной структуры составляет около 2-3 мкм после первого прохода РКУП. Формируются микродвойники деформации, толщина которых составляет ~70 нм. Увеличение степени деформации за счет дополнительных проходов РКУП приводит к дальнейшему уменьшению размерности структуры материала. После второго прохода РКУП толщина двойников уменьшается до ~30 нм. После третьего прохода РКУП толщина двойников уменьшается до ~10 нм. Прочность материала в УМЗ состоянии повышается до значения $\sigma_{\max} \sim 700$ МПа.

В качестве исследуемых характеристик микрогеометрии обработанной поверхности рассматривались высотные и шаговые параметры шероховатости и волнистости. Анализ результатов лазерной сканирующей микроскопии указывает на существенное снижение высоты микронеровностей и уменьшение волнистости поверхности обработанного точением материала по мере измельчения его структуры. Повышение интенсивности режущего воздействия также позволило повысить качество обработки материала с УМЗ структурой, по сравнению с материалом с КК структурой.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00058.

DOI: 10.17223/9785946218412/47

**EFFECT OF THE STRAIN RATE ON THE LOW CYCLE FATIGUE BEHAVIOR OF A
10Cr-2W-Mo-3Co-NbV STEEL AT ROOM TEMPERATURE**

¹Mishnev R., ¹Dudova N., ¹Kaibyshev R.

Belgorod State University, Belgorod, Russia

The effect of a strain rate varying from $\sim 10^{-3}$ to $\sim 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ at a strain amplitude ranging from $\pm 0.25\%$ to $\pm 0.6\%$ on the low cycle fatigue (LCF) behavior and the microstructure of a 10%Cr-2%W-0.7%Mo-3%Co-NbV steel with 0.008 wt.% B and 0.003 wt.% N additions was studied at room temperature. The number of cycles to failure tends to slightly increase with decreasing the strain rate. The fatigue life time curves at all tested strain rates and strain amplitudes could be described using the Basquin-Manson-Coffin relationship. The transition life of $2N_t$, when plastic and elastic strain components are equal, shifted to higher reversals with a decrease in the strain rate from $\sim 10^{-3}$ to $\sim 10^{-4}$ and $\sim 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, whereas the transition total strain amplitude, when plastic and elastic strain components are equal, remained unchanged. At cyclic deformation with low strain amplitude of $\pm 0.25\%$, strain softening is attributed to decreasing dislocation density and lath coarsening, whereas at $\varepsilon_{ac} = \pm 0.6\%$, the knitting reaction between dislocations comprising lath boundaries and trapped lattice dislocation leads to the transformation of lath boundaries to subboundaries and strain softening. At $\varepsilon_{ac} = \pm 0.25\%$, decreasing the strain rate leads to insignificant acceleration of recovery processes, whereas at $\varepsilon_{ac} = \pm 0.6\%$, decreasing the strain rate slows down the knitting reaction, that leads to an increase in density of low-angle boundaries and kernal average misorientation.

DOI: 10.17223/9785946218412/48

ДЕФОРМАЦИЯ И РАЗРУШЕНИЕ ОБРАЗЦОВ ДООТВЕКТИЧЕСКОГО СИЛУМИНА
С МОДИФИЦИРОВАННОЙ ИНТЕНСИВНЫМ ИМПУЛЬСНЫМ
ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ ПОВЕРХНОСТЬЮ

¹Иванов Ю.Ф., ^{2,3}Клопотов А.А., ²Устинов А.М., ¹Петрикова Е.А., ¹Тересов А.Д.,

¹Рыгина М.Е., ²Абзаев Ю.А., ²Волокитин О.Г., ²Власов Ю.А.

¹Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия

²Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, Россия

³Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Создание конструкционных легких материалов с необходимыми макросвойствами является важной проблемой при их использовании в авиационной и космической техники. Известно, что макросвойства поликристаллических сплавов зависят от структурно-фазового состояния на микро- и мезоуровне. Структурно-фазовые состояния в свою очередь определяются как химическим составом, так и технологией обработки. Вследствие этого одним из методов решения такой задачи является подход, основанный на модификации поверхности материала облучением интенсивным импульсным электронным пучком.

В данной работе представлены результаты исследований влияния облучения интенсивным импульсным электронным пучком на механические свойства при деформации растяжением образцов доэвтектического силумина марки АК10М2Н.

В качестве материала исследования использовали силумин марки АК10М2Н (Al-10Si-2Cu-1Ni). Облучение образцов проводили на установке «СОЛО» [1]. Параметры пучка:

длительность импульса пучка электронов 150 мкс, количество импульсов 3, частота следования импульсов $0,3 \text{ с}^{-1}$, плотность энергии пучка электронов 25 Дж/см^2 . Испытание образцов на растяжение осуществлялось на установке «INSTRON 3386» с одновременной фиксацией распределение деформационных полей при помощи оптической измерительной системы VIC-3D [2].

На рис. 1 приведены диаграммы деформирования $\sigma=f(\epsilon)$ при растяжении облученного и не облученного образцов из сплава силумина марки АК10М2Н. Показано, что облучение поверхности силумина марки АК10М2Н приводит к увеличению напряжения разрушения образца в два раза по сравнению с необлученным образцом. Установлено, что облучение электронным пучком поверхности силумина марки АК10М2Н существенно меняет механизмы деформации при растяжении. На деформационной кривой $\sigma=f(\epsilon)$ не облученных образцов можно выделить три стадии, тогда как при растяжении облученных образцов силумина стадийность деформационной кривой не выявляется. Такой вид деформационной кривой коррелирует с распределением полей деформации на поверхности образца: картины распределений относительных деформаций на поверхности облученного образца являются подобными при деформации образца от 0.04 % и до 0.28 %.

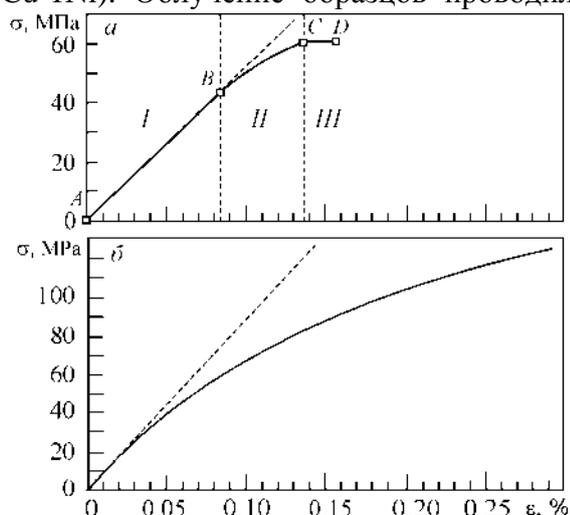


Рис. 1. Диаграммы деформирования не облученного (а) и облученного (б) образцов силумина. *AB* – стадия упругой деформации (стадия I); *BC* – переходная стадия (стадия II); *CD* – стадия деформационного разупрочнения (стадия III) и разрушения

образцов можно выделить три стадии, тогда как при растяжении облученных образцов силумина стадийность деформационной кривой не выявляется. Такой вид деформационной кривой коррелирует с распределением полей деформации на поверхности образца: картины распределений относительных деформаций на поверхности облученного образца являются подобными при деформации образца от 0.04 % и до 0.28 %.

1. Электронно-ионно-плазменная модификация поверхности цветных металлов и сплавов / под ред. Н.Н. Ковалю, Ю.Ф. Иванова. – Томск: НТЛ, 2016. 312 с.

2. Устинов А.М., Клопотов А.А., Потекаев А.И. и др. Особенности разрушения при деформации растяжением клевого соединения сталь/сталь // Известия АлтГУ. Физика. - 2019. - № 1 (105). - С. 50-61.

DOI: 10.17223/9785946218412/49

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ НЕРАВНОВЕСНЫХ
ГРАНИЦ ЗЕРЕН ДИСКЛИНАЦИОННОГО ТИПА В НАНОКРИСТАЛИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛАХ

Д С Зайцев¹, И И Суханов^{1,2}, И А Дитенберг^{1,2}

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск,

Представлены результаты теоретического анализа упруго – напряженного состояния и энергии для двух групп дисклинационных конфигураций с различными пространственными распределениями дисклинаций в зависимости от величины вектора Фпанка. Расчет полей напряжений и энергий проводился в программной среде Maple 17 с использованием явного вида тензора напряжений для клиновых дисклинаций [1]. Анализ энергий дисклинационных конфигураций проведен с использованием численного интегрирования по методу Гаусса.

Установлено, что вне зависимости от плотности дисклинационного заряда всем рассмотренным конфигурациям характерны высокие локальные значения главных компонент тензора напряжений и их градиентов. Максимальные величины присущи плоскостям залегания дисклинаций и не превышают $P = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3 \approx 0,025 \cdot E$. Средняя величина градиентов давления составляет $dP/dx \approx (0,02 - 0,03) \cdot E \cdot \text{нм}^{-1}$.

Исследование пространственного распределения упругой энергии показало, что большая часть энергии во всех конфигурациях локализована вблизи линий дефектов дисклинационного типа. На основе проведенных вычислений была получена оценка энергий конфигураций в широком интервале значений тензора изгиба-кручения 0,2...2 град/нм, которая показала, что энергия эквидистантной (расстояние между дисклинациями постоянно) несколько ниже энергии других конфигураций. Это свидетельствует о том, что эквидистантная конфигурация является энергетически более устойчивой системой.

Работа выполнена в рамках программы гранта РФФИ №17-19-01374.

1. Владимиров В. И. Дисклинации в кристаллах / В.И. Владимиров, А.Е. Романов // – Л.: наука, 1986. – 223 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/50

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМАЦИИ ПРЕГРАД ИЗ
МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА ВЖМ8 ПРИ УДАРНЫХ НАГРУЗКАХ**

Туч Е.В., Майер Я.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

В связи с интенсивным развитием авиационно-космической промышленности возникает необходимость в применении новых материалов в узлах конструкций, работающих в экстремальных условиях. Такие материалы должны обладать высокими прочностными характеристиками и жаропрочностью, поэтому является актуальным вопрос исследования механических характеристик этих материалов. В настоящее время проводится множество исследований свойств монокристаллических материалов при различных нагрузках. Монокристаллы металлов и их сплавов обладают повышенными прочностными свойствами и применяются в авиа- и двигателестроении. Монокристаллический жаропрочный никелевый сплав ВЖМ8, характеризующийся кубической симметрией свойств, применяется в газотурбинных двигателях V поколения [1-4].

В работе представлены результаты расчетов численного моделирования динамического нагружения преграды из монокристаллического сплава ВЖМ8 стальным изотропным ударником. Нагружение преграды из ВЖМ8 производилось вдоль направления, совпадающим с направлением КГО, [001], два других направления осей расчетной системы координат также совпадали с направлениями КГО – [100], [010]. Начальная скорость нагружения 600 м/с. Моделирование процесса упругопластического деформирования ударника и преграды проводилось в рамках механики сплошной среды.

В качестве критерия разрушения применялся критерий N. Jonhson (1971г.), в котором разрушение определяется объемом накопленных микроповреждений. Критическое значение объема накопленных микроповреждений составляло 30%.

Исследование выполнено за счет гранта РФФ № 18-71-00062

1. Е.Р. Голубовский, И.Л. Светлов, К.К. Хвацкий, Закономерности изменения аксиальной и азимутальной анизотропии прочностных характеристик монокристаллов жаропрочных никелевых сплавов для лопаток ГТД, *Авиационно-космическая техника и технология*, 2005, №10 (26)
2. Е.Н. Каблов, Н.В. Петрушин, Е.С. Елютин, Монокристаллические жаропрочные сплавы для газотурбинных двигателей, *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Машиностроение»*. 2011, с.38-52
3. Ю.А. Ножницкий, Е.Р. Голубовский, Монокристаллические рабочие лопатки высокотемпературных турбин перспективных ГТД, *Авиационно-космическая техника и технология*, 2006, №9 (35)
4. Светлов И.Л., Епишин А.И., Кривко А.И., Самойлов А.И., Одинцев И.Н., Андреев А.П. // *ДАН СССР*. 1988. Т. 302. № 2. С. 1372–1375.

DOI: 10.17223/9785946218412/51

**ПРИМЕНЕНИЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО КРИТЕРИЯ РАЗРУШЕНИЯ ДЛЯ
МОДЕЛИРОВАНИЯ РАЗРУШЕНИЯ ПРЕГРАДЫ ИЗ СПЛАВА Д16 ПРИ
ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ**

Туч Е.В., Стребкова Е.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

В настоящее время в авиационной, строительной и космической технике широко применяются конструкционные материалы из-за своей прочности и легкости. Большинство из них обладает анизотропией механических свойств в силу своего строения или механической обработки. При моделировании динамического нагружения конструкционных материалов преград необходимо применение критерия прочности, учитывающего все особенности процесса разрушения таких материалов. Большинство критериев разрушения записаны через напряжения, однако пределы прочности материала могут не существенно отличаться в разных направлениях, в то время как относительное удлинение при отрыве может отличаться в несколько раз. Поэтому представляет интерес исследование критерия разрушения, записанного через деформации и учитывающего анизотропию материала.

В работе представлены результаты численного моделирования динамического нагружения преграды из алюминиевого сплава Д16 стальным ударником цилиндрической формы с различными скоростями. Процесс разрушения материала преграды моделировался с помощью применения критерия разрушения по накопленным пластическим деформациям. Применение этого критерия позволяет отразить анизотропию процесса накопления микрповреждений в различных направлениях и позволяет учитывать анизотропию характеристик прочности материала преграды. Полученные результаты расчетов сравнивались с экспериментальными данными [1], полученными для случаев с единичными разрушениями преграды (151 м/с), и выше, полученными со значительными разрушениями преграды. Численное моделирование процесса разрушения преград выполнено методом конечных элементов в трехмерной постановке.

Работа выполнена по проекту 23.1.2 в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2018-2020 годы и по проекту РФФИ 18-31-00278 мол_а.

1. M. Rodriguez-Millan, D. Garcia-Gonzalez, A. Rusinek, F. Abede, A. Arias Perforation mechanics of 2024 aluminium protective plates subjected to impact by different nose shapes of projectiles // *Thin-Walled Structures*. 2018. T. 123. С.1-10.

DOI: 10.17223/9785946218412/52

**ВАРИАНТЫ РАЗЛОЖЕНИЯ ТЕНЗОРОВ ПОЛНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ ПРИ
МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО
ДЕФОРМИРОВАНИЯ АУКСЕТИЧНЫХ СРЕД С КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИЕЙ
СВОЙСТВ**

^{1,2}Кривошеина М.Н., ¹Туч Е.В., ³Кобенко С.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

³*Нижевартовский государственный университет, Нижневартовск*

При моделировании процессов деформации в твердых телах, характеризующихся значительной анизотропией механических свойств, в некоторых случаях невозможно традиционное разложение энергии упругого деформирования на энергию изменения объема и энергию изменения формы. Для моделирования процессов упругопластического деформирования в твердых телах из материалов с кубической симметрией свойств это определяется направлением нагружения относительно осей симметрии материала. При моделировании нагружения монокристаллов с кубической симметрией свойств в трехмерной постановке вдоль направления $[011]$ применяется иное разложение тензора напряжений – на часть, определяющую анизотропное давление, и девиаторную часть. Это позволяет учесть ауксетичность монокристаллов (определяемая отрицательным значением коэффициента Пуассона), точно определить переход от процессов упругой деформации к упругопластической, а также вносит вклад в результаты моделирования накопления микроразрушений и итоговое разрушение таких материалов. На примере жаропрочных никелевых сплавов в работе показано влияние на результаты численного моделирования в трехмерной постановке применения в математической модели двух вариантов разложения тензоров полных напряжений на части, связанные с напряжениями изменения объема и изменения формы.

Работа выполнена по проекту 23.1.2 в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2018-2020 годы.

DOI: 10.17223/9785946218412/53

**РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПРОДОЛЬНЫХ И СТЕРЖНЕВЫХ ВОЛН В
ЦИЛИНДРАХ ИЗ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ И МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛОВ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОЙ НАГРУЗКЕ**

^{1,2}Кривошеина М.Н., ¹Туч Е.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

При интенсивном развитии авиационных, космических технологий необходимо применение в конструкциях материалов, способных выдерживать интенсивные динамические воздействия. Для прогнозирования отклика различных конструкционных материалов на внешнюю нагрузку в настоящее время широко применяются численные эксперименты по нагружению преград, выполненных из таких материалов. Тест Тейлора является одним из способов исследования динамических механических свойств при ударных нагрузках. Он позволяет протестировать численную методику, применяемую для моделирования деформирования материала при динамической нагрузке, и определить динамические характеристики материала.

В работе представлены результаты численных расчетов упругого деформирования цилиндрических тел из поликристаллических и монокристаллических материалов. В трехмерной постановке моделировался удар цилиндра о жесткую стенку (тест Тейлора). Начальная скорость цилиндра 50 м/с. Целью работы являлось определение отличий стержневых скоростей от скоростей продольных волн в изотропных и анизотропных материалах. В качестве материалов цилиндров применялись изотропный поликристаллический алюминиевый сплав и монокристаллический никелевый сплав ВЖМ8 с кубической симметрией свойств. Для исследования влияния геометрии цилиндра на его деформирование моделировалось два варианта соотношения высоты цилиндра к его диаметру - 1:1 и 3:1. Получены величины стержневых волн в монокристаллическом никелевом сплаве ВЖМ8 с кубической симметрией свойств для различных направлений распространения.

Работа выполнена по проекту 23.1.2 в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2018-2020 годы и по проекту РФФИ 18-31-00278 мол_а.

DOI: 10.17223/9785946218412/54

ОЦЕНКА МОДУЛЯ УПРУГОСТИ ГОРНЫХ ПОРОД ПРИ ОДНООСНОМ
РАСТЯЖЕНИИ ПО ДАННЫМ БРАЗИЛЬСКОГО ТЕСТА

^{1,2}Цой П.А., ¹Усольцева О.М.

¹Институт горного дела СО РАН им. Н.А. Чинакала, Новосибирск

²Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Одним из важных деформационных свойств горных пород является модуль упругости, который, как правило, учитывается при проектировании и сопровождении геоинженерных объектов. Не представляет особой сложности получение модуля упругости на основе диаграмм "напряжение - деформация" из тестов на одноосное сжатие [1, 2]. Эксперименты на одноосное растяжение обычно заменяют на так называемый бразильский тест, или косвенное растяжение, в котором определяется только предел прочности согласно установленным стандартам [3, 4]. Это связано прежде всего с тем, что изготовление галтелей из керна горных пород представляет из себя сложную технологическую задачу. В этой работе предлагается по данным (дисковых образцов с диаметром поперечного сечения $D \sim 30$ мм и толщиной ~ 10 мм, см. рис. 1), которые представляли из себя информацию по напряжениям, полученных в условиях косвенного растяжения [5], а также данных по деформациям с поверхности образца, полученных с помощью виртуального экстензометра (метод корреляции цифровых изображений, приложение GomCorrelate), оценивать модуль упругости E_t на одноосное растяжение. Для этого использована формула [6]

$$E_t = E_s \left((1 - \nu) \left(1 - \frac{D}{L_t} \arctg \frac{2L_t}{D} \right) + (1 + \nu) \frac{2D^2}{4L_t^2 + D^2} \right),$$

где $E_s = d\sigma_t/d\varepsilon_t$ - модуль упругости при косвенном растяжении, $d\sigma_t$ - приращение напряжений при косвенном растяжении, $d\varepsilon_t$ - приращение деформаций при косвенном растяжении, ν - коэффициент Пуассона, $2L_t$ - база виртуального экстензометра.

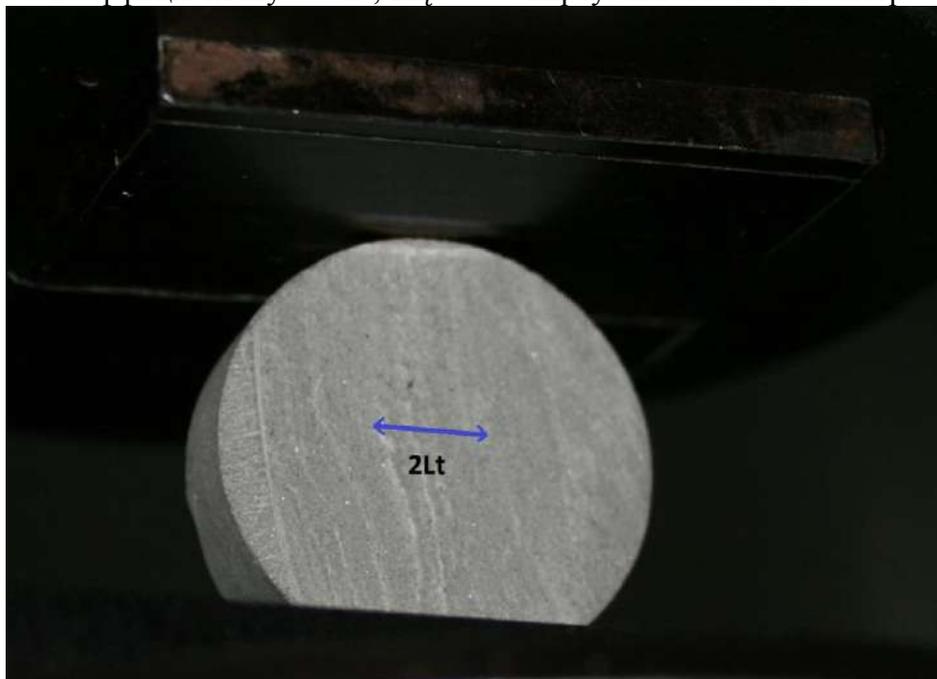


Рис. 1. Образец песчаника между плитами прессы, синей двойной стрелкой схематично показана горизонтальная установка виртуального экстензометра с базой $2L_t$, проходящего через центр поперечного сечения образца.

Оценочные величины для E_t представлены в табл. 1.

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

Таблица 1. Оценочные модули упругости E_t для образцов горных пород.

Горная порода	D , мм	L_t , мм	ν	E_t , ГПа
Долерит	30	3.5	0.24	4.15
Мрамор серый	31.4	3.5	0.35	0.72
Мрамор пятнистый	31.25	3.83	0.28	0.32
Песчаник	31.35	4.25	0.3	0.13

1. ГОСТ 28985-91. Породы горные. Метод определения деформационных характеристик при одноосном сжатии.
2. ASTM D 7012-04. Standard test method for compressive strength and elastic moduli of intact rock core specimens under varying states of stress and temperatures. — 8 p.
3. ГОСТ 21153.3-85 Породы горные. Методы определения предела прочности при одноосном растяжении.
4. ASTM D 3967-95a. Standard test method for splitting tensile strength of intact rock core specimens. — 3 p.
5. Tsoy P. A., Panov A. V., Kolykhalov I. V., Semyonov Z. V. Experimental Study of the Surface Crack Propagation for Rock-disk Specimens // Global View of Engineering Geology and the Environment. 2013. P. 783–787.
6. Malyszko L., Bilko P., Kowalska E. Determination of Elastic Constants in Brazilian Tests Using Digital Image Correlation // Proceedings of 2017 Baltic Geodetic Congress. 2017. P. 153–157.

DOI: 10.17223/9785946218412/55

**СВОЙСТВА, СТРУКТУРА И МАКРОЛОКАЛИЗАЦИЯ ПЛАСТИЧЕСКОГО
ТЕЧЕНИЯ В ВЫСОКОПРОЧНОЙ СТАЛИ С ДЕФОРМАЦИОННЫМ ФАЗОВЫМ
ПРЕВРАЩЕНИЕМ**

Орлова Д.В., Данилов В.И., Горбатенко В.В., Данилова Л.В., Шляхова Г.В., Зуев Л.Б.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Метастабильные аустенитно-мартенситные стали с пластичностью, наведенной фазовым превращением востребованы в авиа- и автомобилестроении при изготовлении ответственных элементов безопасности. Главной их особенностью является наличие *trip*-эффекта, который проявляется в фазовом превращении аустенит – мартенсит при приложении нагрузки [1]. Это сопровождается повышением прочности (до 2000 МПа) и пластичности (до 60%), облегчением формовости, эффективным поглощением энергии удара. В тоже время, многие аспекты деформационного поведения *trip*-сталей не до конца изучены. Так стадийность и тип деформационных кривых меняются в зависимости от предварительной обработки. Таким образом, исследование структуры и деформационного поведения данного материала на макроскопическом уровне является актуальным.

Исследования проводились на образцах хромоникельмолибденовой *trip*-стали марки 23X15H5AM3 (ВНС9-Ш) производства ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов». Пластины стали в состоянии поставки толщиной 1 мм подвергались аустенизации при температуре 1400 К в течение 1 часа с последующим охлаждением в воде. После чего проводилась многопроходная теплая прокатка при температуре 620 К. Исследовались три состояния материала: после аустенизации (1), после аустенизации и теплой прокатки с обжатием 40 % (2), после аустенизации и теплой прокатки с обжатием 51 % (3). Для каждого состояния электроискровым методом были подготовлены по пять образцов типа «двойная лопатка» с шириной и длиной рабочей части 6 мм и 40 мм соответственно.

Одноосное растяжение при комнатной температуре производили на универсальной машине Walter + Bai ag, LFM 125 при скорости перемещения подвижного захвата 0,4 мм/мин. Регистрация полей локальных перемещений осуществлялась методом DIC (digital image correlation) одновременно с растяжением. Структурные параметры определяли металлографически на оптическом микроскопе Neophot-21, тонкую структуру исследовали на атомно-силовом микроскопе Solver P47H-Pro. Количество мартенсита деформации определяли по результатам измерения намагниченности материала на многофункциональном вихретоковом приборе МВП-2М и рентгеноструктурным методом в $CoK\alpha$ - излучении.

Металлографические исследования показали, что структура образцов в состоянии (1) является аустенитной. Средний размер зерна ~ 37 мкм, некоторые зерна содержат двойники. После обжатия на 40% в образцах появляется мартенситная фаза в объеме ~ 28%, наблюдается хорошо развитый поверхностный рельеф, возрастает количество двойников. Образовавшийся мартенсит имеет грубое строение, представляет дендритный стержень с ответвлениями шириной не более 0,2 мкм. Размер аустенитного зерна возрастает до ~ 117 мкм. С увеличением степени обжатия до 51% происходит образование пакетного мартенсита со сложной субструктурой, состоящего из тонких, коротких пластин. Объемное содержание мартенсита уменьшилось до 21%. Средний размер аустенитного зерна составил ~ 141 мкм.

Образцы в состоянии (1) имеют диаграмму нагружения с небольшим зубом текучести, за которым следует участок с небольшим плавно увеличивающимся упрочнением (рис. 1, кр. 1). Данный участок может рассматриваться как несовершенная площадка текучести. К моменту времени 300 с он сменяется параболической стадией с наложенной на нее прерывистой текучестью. Локализация деформации начинается на площадке текучести путем зарождения и расширения нескольких полос Чернова – Людерса (ПЧЛ), фронты которых заматают пространство рабочей части образца и аннигилируют.

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

Места аннигиляции фронтов разбивают рабочее поле образца на обособленные части. Прерывистой текучести соответствует движение фронтов локализованной деформации, которые зарождаются в местах аннигиляции фронтов ПЧЛ и движутся между ними. Это процесс многократно повторяется вплоть до разрушения. Поведение их полностью совпадает с поведением полос Портевена – Ле Шателье (ПЛШ) в дуралюмине.

В состоянии 2 образцы имеют диаграммы нагружения (рис.1, кр.2) и проявляют характер локализации подобные вышеописанному. Отличие лишь в том, что предел текучести здесь в два раза выше, значительно увеличилось временное сопротивление разрушению, но уменьшилось относительное удлинение до разрыва. Прерывистая текучесть и движение полос ПЛШ происходит на всем протяжении кривой нагружения вплоть до разрушения.

В состоянии 3 образцы демонстрируют деформационные кривые с хорошо оформленным зубом текучести и наклонной площадкой текучести (рис. 1, кр. 3). Сбросы напряжения на стадии параболического упрочнения не наблюдаются. Упругопластическому переходу соответствует появление нескольких фронтов локализованной деформации, подобно тому, как это происходит при множественном зарождении ПЧЛ при деформировании образцов малоуглеродистой стали. Рабочая область образца опять разбивается на обособленные части, причем каждая из этих областей замечается деформационным фронтом однократно. После окончания площадки текучести наблюдается распространение фронтов локализации деформации, связанных с образованием полос ПЛШ, несмотря на то, что на деформационной кривой прерывистая текучесть незаметна. Когда общая деформация достигает $\approx 0,08$, распространение полос ПЛШ прекращается.

Проверка фазового состава образцов после деформации показала, что они полностью находятся в мартенситном состоянии. Следовательно, наблюдаемые фронты локализованной деформации являются фронтами деформационного фазового превращения аустенит \rightarrow мартенсит. Это позволяет утверждать, что превращение в *trip*-стали может описываться в терминах распространения полос Чернова – Людерса и полос Портевена – Ле Шателье, поэтому к ним применима теория автоволновой локализованной пластичности [2]. На упругопластическом переходе в виде площадки текучести фазовый переход аустенит \rightarrow мартенсит реализуется в виде нескольких автоволн переключения локализованной пластичности, которые зарождаются, заматают пространство объекта и аннигилируют. Зоны аннигиляции становятся источниками автоволн возбуждения локализованной пластичности, процессы зарождения и распространения которых многократно повторяются до тех пор, пока деформационное фазовое превращение аустенит \rightarrow мартенсит не завершится полностью.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук России на 2013-2020 гг., направление III.23.1.2 и частично поддержана грантом РФФИ № 17-08-00751-а.

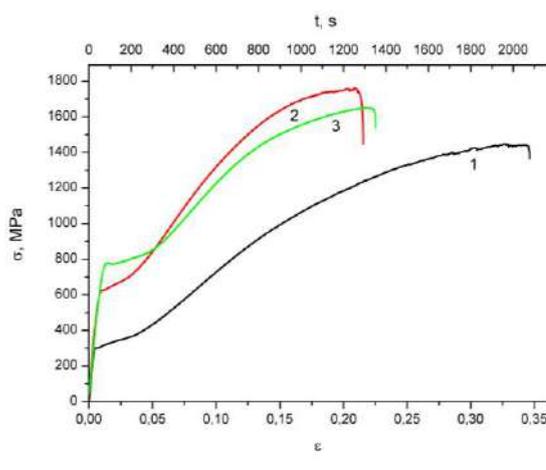


Рис. 1 Кривые нагружения

1. M. Callahan, O. Hubert, F. Hild, A. Perlade, and J.-H. Schmitt, Mater. Sci. Eng. 704, 391–400 (2017).
2. L. B. Zuev, J. Appl. Mech. Tech. Phys. 58(2), 328–334 (2017).

DOI: 10.17223/9785946218412/56

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РАЗРУШЕНИЯ
ПЛАСТИЧНЫХ ТЕЛ С ТРЕЩИНАМИ**

Дерюгин Е.Е.

*Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Russia, Tomsk
dee@ispms.tsc.ru*

В линейной механике разрушения хорошо разработан аппарат для определения критериев разрушения хрупких материалов. Однако до настоящего времени встречаются большие математические и вычислительные трудности, связанные с учетом влияния пластической деформации на поле напряжений для тел с трещинами [1, 2]. В данной работе предлагается новая модель трещины, учитывающая наличие зоны пластической деформации (ЗПД) вокруг трещины и ее влияние на поле напряжений в твердом теле. Модель позволяет проводить энергетический анализ характеристик разрушения пластичных тел с трещинами.

Трещина с момента зарождения и в процессе распространения всегда окружена слоем пластически деформированного материала. В работе приводится оригинальный метод построения ЗПД вокруг трещины. Модельная трещина представляет собой полость в плоскости в виде эллипса с полуосями a и b под действием внешнего напряжения растяжения σ , направленного вдоль малой полуоси b эллипса (рис. 1).

В целом трещина представляет собой семейство вложенных друг в друга так называемых элементов релаксации (ЭР) в виде эллипсов (рис. 1). Контуры эллипсов расположены в слое толщиной h . Каждый ЭР в семействе является самостоятельным элементом эллиптической формы, связанным функционально с элементарной долей внешнего напряжения $d\sigma$ через переменную t : $d\sigma(t) = (\beta+1)\sigma^\beta dt$, где β – числовой параметр. Пластическая деформация внутри данного эллипса вызывает релаксацию внешнего напряжения. Релаксация напряжения $d\sigma(t)$ до нуля внутри эллипса обеспечивает однородное поле пластической деформации с компонентами



Рис. 1. Трещина в окружении пластически деформированного материала.

$$d\varepsilon_x(t) = -d\sigma(t)/E, d\varepsilon_y(t) = d\sigma(1+2a(t)/b(t))/E, d\varepsilon_{xy}(t) = 0, \quad (1)$$

где E – модуль Юнга. (рис. 1). Длины полуосей равны соответственно $a(t) = a+h(1-t)$, $b(t) = b+h(1-t)$. Переменная t изменяется в пределах от 0 до 1, a и b – большая и малая полуоси трещины. Согласно принятому определению, значение $t = 0$ соответствует эллипсу, охватывающему ЗПД. Увеличение t соответствует последовательному переходу от внешней границы ЗПД к нижней, которая является свободной поверхностью трещины. Конкретное значение t выбирает определённый контур семейства. Точка на оси x будет соответствовать контуру ЭР со значением $t = 1 - (x-a)/h$.

На основе известных свойств эллиптического выреза [3, 4], с учетом зависимостей (1), получено уравнение энергии образования трещины длиной $l = 2a$:

$$U = \frac{\pi\sigma^2}{2E} \left[2a^2 + \frac{5ah}{\beta+2} + ba + \frac{6h^2}{(\beta+3)(\beta+2)} \right]. \quad (2)$$

Уравнение (2) позволяет определять критерии разрушения для пластичных тел в зависимости от геометрических параметров модели (a , b , h) и параметра β , определяющего характер распределения пластической деформации в ЗПД.

На рис. 2 приведена зависимость энергии образования трещины U от ее полудлины a для шести размеров ЗПД, определяемых уравнением $h_i = 0.2i$ mm ($i = 0 \dots 5$). Видно, что энергия U

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

монотонно растет в процессе распространения трещины. Формирование ЗПД вокруг трещины требует дополнительной работы внешних приложенных сил.

Изменение потенциальной энергии пластины единичной толщины, связанное с распространением трещины на расстояние $dl = 2da$, равно

$$\frac{\partial U}{\partial l} = \frac{\partial U}{2\partial a} = \frac{\pi\sigma^2}{4E} \left[\frac{5h}{\beta+2} + 4a + b \right] = G. \quad (3)$$

В механике разрушения G является энергетической характеристикой разрушения и называется «скоростью

высвобождения упругой энергии» при распространении трещины [1]. Из уравнения (2) следует, что в общем случае пластическая деформация увеличивает трещиностойкость материала: чем больше зона пластической деформации h и меньше значение параметра β тем выше значение G . Анализ уравнения (2) позволил сформулировать общую закономерность: чем меньше градиент пластической деформации перед вершиной трещины, тем выше трещиностойкость материала.

При отсутствии ЗПД ($h = 0$) и $b = 0$ из уравнения (3) следует известное выражение для скорости высвобождения упругой энергии трещины Гриффитса [1, 2]: $G_b^{h=0} = \pi\sigma^2 a/E$.

Основной характеристикой трещиностойкости хрупких материалов с трещиной отрыва является функция $K_I = \sqrt{GE} = \sigma\sqrt{\pi a}$, которая в механике разрушения носит название коэффициента интенсивности напряжений (КИН). Подобную характеристику можно сформулировать и для пластичных материалов, подставив под корень выражение (3) для G :

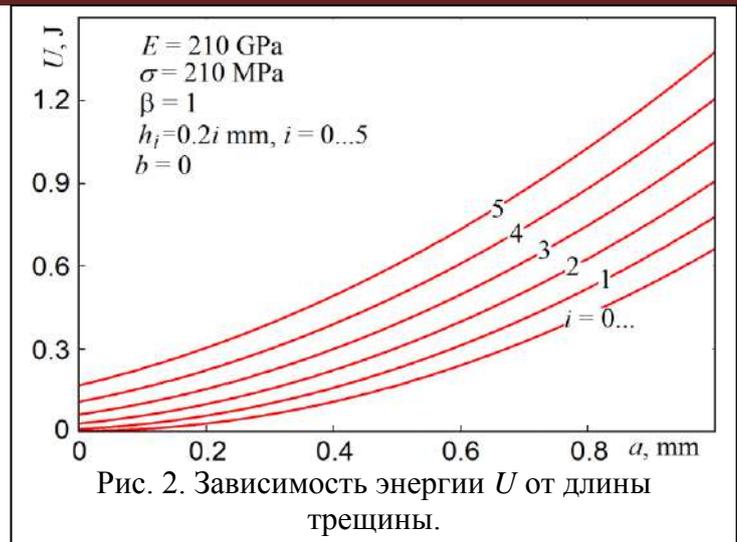
$$K_I = \sigma \sqrt{\pi \left[a + \frac{5h}{4(\beta+2)} + \frac{b}{4} \right]}. \quad (4)$$

Характеристика K_I является более универсальной по сравнению с G , поскольку не зависит от модуля Юнга материала. По определению, K_I является силовой характеристикой разрушения твердого тела.

Использование уравнений (2) и (3) позволяет анализировать критерии разрушения малоразмерных образцов пластичных материалов, когда размеры ЗПД соизмеримы с размером трещины.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление исследований III.23, и поддержана Российским Фондом Фундаментальных исследований, проект № 17-08-00377.

1. Anderson T.L. Fracture mechanics. Fundamentals and Applications. Third Edition. (2005) Taylor & Francis Group 6000 Broken Sound Parkway NW. <http://www.taylorandfrancis.com>
2. Broek D. Elementary engineering fracture mechanics (1974) Leiden.
3. Eshelby J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems // Proc. Roy. Soc. Lond. 241A (1957) 376-396.
4. Markenscoff X. Cracks as Limits of Eshelby Inclusions // Physical Mesomechanics 22 No 1 (2019) 42-45.



DOI: 10.17223/9785946218412/57

**ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ
СТАЛИ ГАДФИЛЬДА НА ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И
ДЕФОРМАЦИЮ**

¹Лычагин Д.В., ²Филиппов А.В., ²Новицкая О.С.

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

Аустенитная сталь Гадфильда широко применяется для производства разнообразных изделий, которые работают в условиях трения с ударными нагрузками. Её использование обусловлено высокой износостойкостью и способностью к деформационному упрочнению. Исследования стали показали, что в качестве основных механизмов деформации выступают двойникование и (или) дислокационное скольжение. Степень реализации первого или второго механизма зависит от кристаллографической ориентации и знака, приложенного напряжения. В случае изучения влияния кристаллографической ориентации при трении необходимо учитывать направления нормальной нагрузки и силы трения. Кроме этого необходимо рассматривать различие схемы главных напряжений в разных участках у поверхности трения. Высокая способность к деформационному упрочнению стали Гадфильда субструктурным упрочнением поверхностного слоя в условиях сложной схемы напряженного состояния. В процессе фрикционного воздействия увеличивается плотность дефектов и создаются предпосылки для появления усталостных трещин и последующего разрушения поверхностных слоев. Трение скольжения сопровождается деформацией, схватыванием, срывом и срезом элементов микронеровностей поверхностей взаимодействующих тел. Величина напряжений и температура на микроскопических контактных площадках значительно выше номинального напряжения и объемной температуры. Повышенная температура и напряжения способствуют развитию интенсивных деформационных процессов в поверхностном и приповерхностном слоях трущихся материалов. В результате происходит наноструктурирование трибологических слоев. Формирование наноструктурированного слоя изменяет условия контактного взаимодействия между трущимися поверхностями и сказывается на деформационном поведении материала. В процессе трения генерируются упругие деформационные волны порождающие акустическую эмиссию. Акустический сигнал можно использовать для контроля развития износа. Использование монокристаллов позволяет провести оценку сдвиговых напряжений в системах скольжения и сравнить активность систем сдвига с развитием следов сдвига на гранях монокристаллов, а также с трибологическими характеристиками. В изложенной постановке была выполнена данная работа, посвященная исследованию деформационного поведения монокристаллов стали Гадфильда с различной кристаллографической ориентацией в условиях сухого трения скольжения при комнатной температуре.

В результате выполненных экспериментальных исследований установлен циклический характер деформирования и изнашивания монокристаллов. Цикличность выражается в чередовании процессов накопления и распространения деформации от поверхности трения в основной объем материала, износа сильно деформированного приповерхностного слоя и повторного накопления и распространения деформации. Изменение параметров сигналов акустической эмиссии связано с эволюцией деформационных процессов и развитием износа. Различные стадии эволюции износа отражаются на медианной частоте и энергии сигнала акустической эмиссии. Кристаллографическая ориентация отражается в изменении длительности процесса приработки трибосопряжения, продолжительности циклов накопления деформации и изнашивания, в значениях параметров трения и сигнала акустической эмиссии.

Авторы выражают благодарность Чумлякову Ю.И. за предоставление образцов монокристаллов стали Гадфильда для исследований. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-08-00377 а.

DOI: 10.17223/9785946218412/58

**ЭВОЛЮЦИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ДИСПЕРСНО-УПРОЧНЕННОГО СПЛАВА
V–Cr–W–ZrO₂ ПРИ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ ПОД ДАВЛЕНИЕМ**

^{1,2}Смирнов И.В., ^{1,2}Гриняев К.В., ^{1,2}Тюменцев А.Н., ³Чернов В.М., ^{1,2}Дитенберг И.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*НИ Томский государственный университет, Томск*

³*АО Высокотехнологический научно-исследовательский институт
неорганических материалов им. А.А. Бочвара, Москва*

Изучены особенности структурного состояния и определены значения микротвердости дисперсно-упрочненного ванадиевого сплава V–8.51 Cr–0.04 W–0.65 Zr–1.34 O–0.04 C–0.04 N (ат. %) на разных стадиях интенсивной пластической деформации методом кручения на наковальнях Бриджмена ($e \approx 0.7 - 6.6$).

Обнаружено, что уже на начальных этапах деформации ($e \approx 0.7$) активируются интенсивные процессы фрагментации и переориентации кристаллической решетки. При $0.7 < e < 2.7$ реализуются как механизмы дислокационного скольжения, так и инициализируется дислокационно-дисклинационный механизм, приводящий к формированию анизотропной субмикроструктурной структуры. Увеличение степени деформации до $2.7 \leq e < 4.7$ сопровождается образованием субмикроструктурной структуры во всем объеме материала вследствие интенсивной реализации дислокационно-дисклинационного механизма. При $4.7 \leq e \leq 6.6$ в основном наблюдается трансформация внутренней структуры субзерен с формированием в них наноструктурного двухуровневого состояния в результате коллективной реализации квазивязких механизмов совместно с дислокационными и дисклинационными модами деформации.

Трансформация микроструктуры в условиях деформации кручением под давлением сопровождается изменением значений микротвердости. Обсуждаются основные механизмы упрочнения и их вклад на разных стадиях деформации.

Исследования проведены с использованием оборудования Томского материаловедческого центра коллективного пользования НИ ТГУ. Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/59

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ И МИКРОСТРУКТУРНЫХ АСПЕКТОВ
ЛОКАЛИЗАЦИИ ПЛАСТИЧЕСКОГО СДВИГА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВИДАХ
ДИНАМИЧЕСКОГО НАГРУЖЕНИЯ**

¹Соковикова М.А., ²Симонов М.Ю., ¹Чудинов В.В., ¹Оборин В.А., ¹Наймак О.Б.

¹*Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь*

²*Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь*

Целью данной работы является теоретическое обоснование и экспериментальное подтверждение решающей роли структурных переходов в ансамбле дефектов мезоуровня (микросдвигов и микротрещин) как одного из механизмов локализации пластической деформации при высокоскоростном нагружении.

Для изучения процессов локализации пластической деформации в режиме близком к чистому сдвигу при динамическом нагружении на стержне Гопкинсона – Кольского были разработаны и запатентованы образцы специальной формы и оснастка, обеспечивающие реализацию плоского деформированного состояния [1] и образцы, для исследования локализации пластического сдвига при динамическом кручении [2]. Полученные распределения температурных полей на поверхности образцов в режиме реального времени позволяют судить о развитии процесса локализации пластической деформации, рис.1.

На оригинальной баллистической установке по исследованию пробивания были нагружены образцы из сплава алюминия АМг6. При высокоскоростном взаимодействии ударника с мишенью реализуется разрушение в виде формирования и выноса пробки

Температурные поля в реализованных процессах высокоскоростного деформирования исследовались «in-situ» с использованием высокоскоростной инфракрасной камеры CEDIP Silver 450M [3].

Измеренная температура в зоне локализации не подтверждает традиционные представления о механизме локализации деформации, обусловленном термопластической неустойчивостью.

Проведены динамические испытания образцов, специальной формы из сплавов АМг6, Д16 и Сталь 3, на разрезном стержне Гопкинсона-Кольского с применением системы неинвазивного измерения деформаций StrainMaster.

Построены поля перемещений и деформаций в образцах специальной формы из сплавов АМг6, Д16 и Сталь 3, испытанных при динамическом нагружении на стержне Гопкинсона-Кольского.

Сравнение экспериментально полученных полей температур и полей деформаций с результатами проведенного численного моделирования, проведенного с учетом особенностей кинетики накопления мезодефектов в материале, дает удовлетворительное соответствие с точностью ~20%.

Сохраненные после эксперимента образцы подвергались микроструктурному анализу с помощью оптического интерферометра-профилометра и сканирующего электронного микроскопа. Структурный анализ показал коррелированное поведение ансамбля дефектов, которое может быть классифицировано, как структурный переход, обеспечивающий локализацию деформации.

Данные экспериментальных исследований, изучение структуры деформированных образцов, а также данные численного моделирования [4-6], проведенного с учетом особенностей кинетики накопления микродефектов в материале позволяют предполагать, что один из механизмов локализации пластической деформации при высокоскоростном нагружении обусловлен скачкообразными процессами в дефектной структуре материалов.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ 17-08-00905_a, 17-41-590149 p_a, 18-08-01186_a, 19-48-590009 p_a.

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

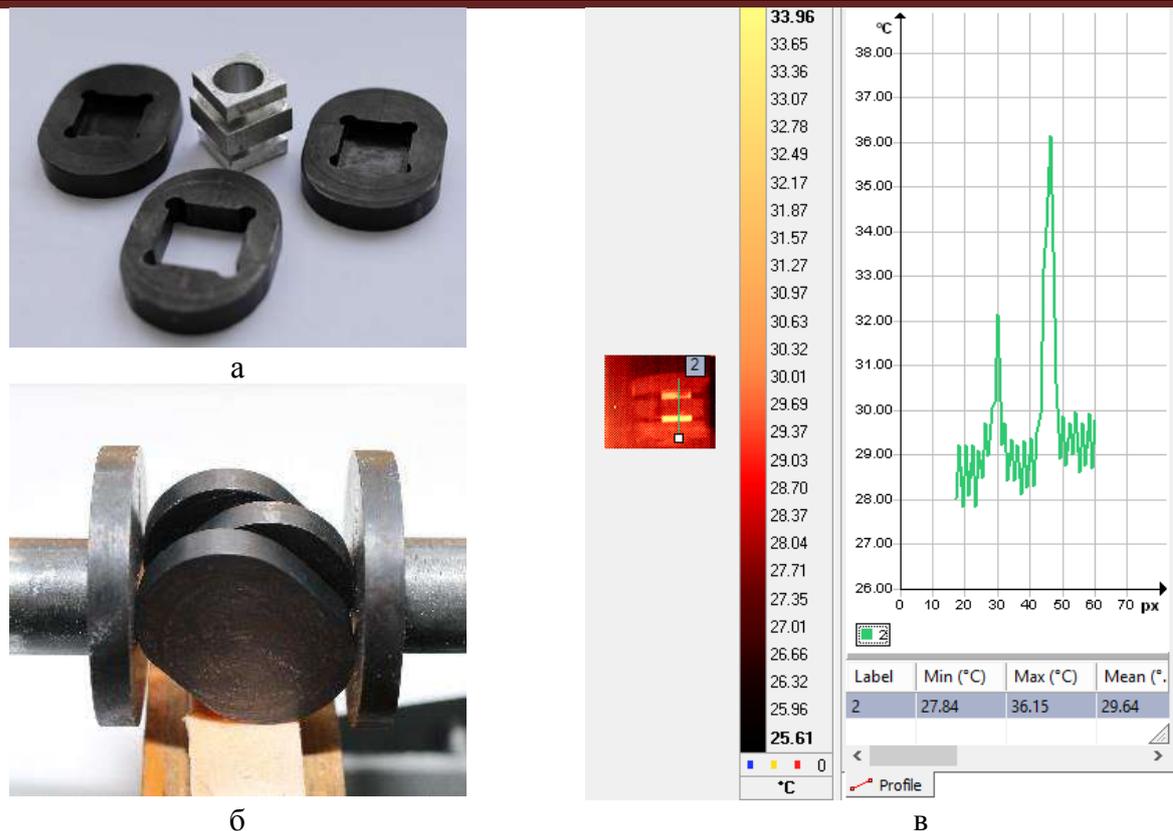


Рис. 1. а) Образец и оснастка для испытаний на динамическое кручение. б) Образец и оснастка установленные между стержнями Гопкинсона – Кольского. в) Образец в процессе испытаний в инфракрасных лучах и график зависимости температуры от координаты в выбранный момент времени, материал образца Д16, максимальная температура ~ 36⁰С.

1. Образец для испытания на сдвиг (варианты) и способ испытаний его: пат. 2482463 Российская Федерация / Наймарк О.Б., Баяндин Ю.В., Сокоиков М.А., Плехов О.А., Уваров С.В., Банников М.В., Чудинов В.В. – № 2011114711/28; заявл. 14.04.2011; опубл. 20.05.2013, Бюл. № 14.
2. Устройство для испытания материала на сдвиг и кручение при скорости деформации 10^2 - 10^5 с⁻¹ и способ определения зависимости максимального касательного напряжения от деформации сдвига в образце материала в виде сплошного цилиндрического стержня и способ определения зависимости напряжения от деформации сдвига в образце материала в виде тонкостенной цилиндрической трубы с использованием этого устройства: пат. 2584344 Российская Федерация / Наймарк О. Б., Сокоиков М. А., Плехов О. А., Уваров С. В., Чудинов В. В., Билалов Д. А., Оборин В. А. № 2014146367/28, заявл. 18.11.2014; опубл. 20.05.2016. Бюл. № 14.
3. Сокоиков М.А, Билалов Д.А., Чудинов В.В., Уваров С.В., Плехов О.А., Терехина А.И., Наймарк О.Б. Неравновесные переходы в ансамблях дефектов при динамической локализации пластической деформации // Письма в Журнал технической физики. 2014. Том.40. Выпуск 23. С.82 -88.
4. Наймарк О. Б. Коллективные свойства ансамблей дефектов и некоторые нелинейные проблемы пластичности и разрушения // Физическая мезомеханика. 2003.Т. 6. № 4. С.45-72.
5. Билалов Д.А., Сокоиков М.А., Чудинов В.В., Оборин В.А., Баяндин Ю.В., Терехина А.И., Наймарк О.Б. Исследование локализации пластического сдвига в алюминиевых сплавах при динамическом нагружении // Вычислительная механика сплошных сред. 2015. Т. 8. №3. С.319-328.
6. Билалов Д.А., Сокоиков М.А., Чудинов В.В., Оборин В.А., Баяндин Ю.В., Терехина А.И., Наймарк О.Б. Численное моделирование и экспериментальное исследование локализации пластической деформации при динамическом нагружении образцов в условиях близких к чистому сдвигу // Вычислительная механика сплошных сред. 2017. Т. 10 № 1. С.103-112.

DOI: 10.17223/9785946218412/60

**EFFECT OF SHORT-TERM AGING ON THE IMPACT TOUGHNESS OF ADVANCED
10% CR STEEL**

Mishnev R., Dudova N., Kaibyshev R.
Belgorod State University, Belgorod

Heat-resistant high-chromium martensitic steels are widely used in various critical components of fossil power plants due to their superior creep resistance and high-temperature strength. High fracture toughness is an important property to assure the reliability of steam turbine parts produced from these steels. In this work, the effect of short-term aging (100 h) at 650°C on the temperature dependence of impact toughness and fracture behavior of advanced 10% Cr steel with low N and high B contents was studied. The steel in tempered condition exhibits the ductile-brittle transition temperature (DBTT) of ~10°C and the Charpy V-notch impact energy of 240 J/cm² at room temperature. Aging for 100 h at 650°C leads to the increase in the DBTT to 35°C and decrease in the impact toughness at 20°C to 90 J/cm². Effect of the fine Laves phase particles (with size < 100 nm) precipitated at lath/grain boundaries on the impact toughness is analyzed. The Laves phase particles serve as additional nucleation sites for microcracks/voids facilitating unstable crack propagation. This is the main reason for decreasing the stable crack propagation energy and impact toughness of the steel.

DOI: 10.17223/9785946218412/61

ОСОБЕННОСТИ ДЕФЕКТНОЙ СУБСТРУКТУРЫ В ЗОНАХ ЛОКАЛИЗАЦИИ
КВАЗИВЯЗКОЙ МОДЫ ДЕФОРМАЦИИ

¹Суханов И.И., ^{1,2}Тюменцев А.Н.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

В нанокристаллах никеля высокой (99,998 %) чистоты в условиях интенсивной пластической деформации кручением на наковальнях Бриджмена обнаружены нанополосы переориентации типа $\langle 110 \rangle$, которые характеризуются наличием в них высоко-дефектных структурных состояний с малоугловыми дискретными и высокими непрерывными разориентировками с кривизной кристаллической решетки десятки град/мкм. Образование этих полос наблюдается одновременно с активизацией квазивязкой моды деформации потоками неравновесных точечных дефектов в полях высоких локальных напряжений [1] и явлением локализации деформации в области упругих дисторсий [2]. В качестве источников напряжений и элементарных дефектов – носителей квазивязкой моды могут выступать нанодиполи частичных дисклинаций.

Методом прямого разрешения кристаллической решетки обнаружено, что образование и движение дисклинационных конфигураций проявляется на стадии зарождения пластических сдвигов и поворотов. Так распространение нанодиполя частичных дисклинаций приводит к формированию нанополосы переориентации с дискретной границей разориентации и значительной величине пластического сдвига. Показано, что при значениях ширины нанополосы (плеча диполя) $l \approx 5$ нм и азимутальной компоненте угла разориентации или мощности диполя и $\varphi_{аз.} \approx 10^\circ$ величина локального сдвига внутри полосы в отличие от нанополос упругой деформации составляет $\gamma \geq 17$ %. Установлено, что внутри нанополосы переориентации расстояние между формирующими контраст плоскостями кристаллической решетки увеличивается $\Delta d/d \approx \varepsilon_{упр.} \approx (0.018-0.034)$.

На основе анализа упруго-напряженного состояния нанодиполя частичных дисклинаций проведены теоретические оценки скорости движения точечных дефектов V и движения нанодиполя частичных дисклинаций \dot{L} . Продемонстрировано, что в рамках квазивязкого механизма деформации в зависимости от энергии активации миграции точечных дефектов (вакансий, межузельных атомов) и температуры деформации скорость квазивязкой моды деформации может достигать высоких значений близких к скорости звука в металлах.

Работа выполнена в рамках программы гранта РФФИ №17-19-01374.

1. Тюменцев А.Н., Дитенберг И.А. Нанодиполи частичных дисклинаций как носители квазивязкой моды деформации и формирования нанокристаллических структур при интенсивной пластической деформации металлов и сплавов // Физ. мезомех. – 2011. – Т. 14. – № 3. – С. 55-68.

2. Тюменцев А.Н., Дитенберг В.А., Коротаев А.Д., Денисов К.И. Эволюция кривизны кристаллической решетки в металлических материалах на мезо- и наноструктурном уровнях пластической деформации // Физическая мезомеханика. – 2013. – Т. 16, № 3. – С. 63–79.

DOI: 10.17223/9785946218412/62

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЗТА КОМПОЗИТОВ ПРИ
УСТАЛОСТНОМ НАГРУЖЕНИИ

¹Коробенков М.В., ²Левков Р.В., ¹Нарикович А.С., ²Киселева Т.А., ¹Снигирев А.А.

¹*Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград*

²*Томский государственный университет, Томск*

Пористые керамические композиты привлекают в последнее время пристальное внимание в качестве остеозамещающих материалов. Разнообразие методик получения оксидных керамических композитов и исследования материалов представляют наибольший интерес, обусловленный взаимным влиянием поровой, зеренной структуры и фазового состава на усталостное поведение. Известно, что контроль технологических параметров получения композиционных материалов, таких как дисперсность исходной порошковой системы, давление формования и температура спекания позволяет получать композиты с заданной пористостью.

Целью данной работы было исследование влияния характера внутренней структуры ЗТА композитов на усталостную долговечность при испытании на трехточечный изгиб.

Призматические образцы для исследования были получены из порошка системы $ZrO_2(MgO)$ и Al_2O_3 . Порошковая система была мехактивирована в шаровых мельницах в течение 24 часов. Образцы были получены изостатическим прессованием с последующим спеканием при температурах 1400, 1500 and 1650 °С с высокотемпературной выдержкой в 1 час. Пористость полученных образцов была измерена гидростатическим методом в дистиллированной воде и составила 21%, 11% and 6.5% для температурных режимов 1400, 1500 and 1650 °С соответственно.

Определение физико-механических свойств образцов ЗТА-композитов проводили при испытании методом трехточечного изгиба с использованием электродинамической испытательной системы Instron ElectroPuls E1000. Для определения усталостной долговечности были приняты условия нагружения представленные однополярным синусоидальным нагружением от преднагрузки 8 Н с размахом цикла, соответствующего трем диапазонам нагружения 0.9, 0.8 и 0.7 от предела прочности на изгиб и частотой воздействия 4 Гц.

Методами современной рентгеновской томографии с использованием томографа Y.Cheetah фирмы "YXLON" проводилась оценка внутренней структуры, наличия дефектов, пустот и микротрещин в объеме исследуемых образцов. Режимы сканирования образцов подбирали с учетом температурных особенностей изготовления образцов. Для образцов с пористостью 21% - напряжение 30 кВ, сила тока 95 мкА. Для образцов с пористостью 11% - напряжение 50 кВ, сила тока - 80 мкА. Для образцов с пористостью 6.5% - напряжение 20 кВ, сила тока 100 мкА.

Результаты проведенных усталостных испытаний исследуемых керамических композитов имеют повышенный разброс, связанный с особенностями изготовления композитов методами порошковой металлургии. Результаты определения усталостной долговечности композитов показали, что наиболее устойчивыми оказались образцы с пористостью 6.5%. При нагрузке 80% от критической некоторые образцы выдерживали 650 тысяч циклов нагружения. Наиболее недолговечными оказались образцы с пористостью 11% и 21%, при нагрузке 90% от критической некоторые не выдерживали 1 тысячи циклов нагружения. Наличие во внутренней структуре композита достаточного количества дефектов в виде пор и микротрещин понижает усталостную прочность материалов.

Исследование было поддержано из средств субсидии, выделенной на реализацию Программы повышения конкурентоспособности БФУ им И.Канта.

DOI: 10.17223/9785946218412/63

ДЕФОРМИРОВАНИЕ ОБРАЗЦОВ АЛЕВРОЛИТА С НАРУШЕНИЯМИ
СПЛОШНОСТИ ПРИ ТРЕХСТАДИЙНОМ ПРЯМОМ СДВИГЕ

Усольцева О.М., Цой П.А., Семенов В.Н.

Институт горного дела им. Н.А. Чинакала» СО РАН, Новосибирск

Геологическая среда является существенно неоднородной, состоит из блоков, пластов, слоев, линз, нарушений сплошности разной формы и размера, залегающих в земной коре горизонтально, наклонно или в виде сложных складок, характеризуется большой сложностью структуры. Сдвиг по нарушению сплошности является одним из основных причин разрушения подземных тоннелей и горных выработок, стволов скважин, бортовых откосов глубоких карьеров. Понимание сдвигового поведения позволяет оптимальным образом проектировать горнотехнические сооружения, и прогнозировать геомеханическое состояние массивов горных пород.

Целью данного лабораторного исследования являлось определение характера деформирования образцов из аргиллита с нарушениями сплошности при нагружении в условиях чистого сдвига. За основу методики лабораторного определения сопротивления сдвигу нарушений сплошности горных пород взята обновленная версия стандарта ISRM ASTM D 5607–08, опубликованная в [1, 2]. В общем случае, методика включает в себе требования к проведению испытаний по определению сопротивления прямому сдвигу образцов горных пород, как сплошных, имеющих невысокую прочность, так и содержащих нарушения сплошности, при двух случаях граничных условий: постоянная нормальная (нагрузка, действующая в направлении, перпендикулярном сдвиговому усилию) нагрузка (Constant normal load – *CNL*) и постоянная нормальная жесткость (Constant normal stiffness – *CNS*) (жесткость в направлении, перпендикулярном действию сдвигового усилия). При этом, нарушения сплошности могут быть открытыми или почти закрытыми, и должны проявлять ничтожно слабую прочность на разрыв. Для проведения экспериментов был разработан и создан стенд, подробно описанный в [3], с возможностью выполнения сдвигового нагружения по стандарту ASTM D 5607 на базе сервогидравлического одноосного пресса Instron 8802.

Испытание проводилось при граничном условии *CNL*, которое подходит для ситуаций, когда окружающая горная порода позволяет нарушению сплошности свободно сдвигаться без ограничений дилатансии, в результате чего сохраняется постоянное нормальное напряжение во время процесса сдвига. Испытание на сдвиг при граничном условии *CNL* имитирует реальные условия скольжения блоков в горном массиве на открытых скальных склонах.

Программа нагружения задавалась следующим образом: 1) предварительно прикладывалась нормальная нагрузка, перпендикулярная усилию сдвига, со скоростью 0,01 МПа/с до достижения заданного значения нормального напряжения, и в дальнейшем она удерживалась постоянной для каждой стадии нагружения; 2) после стабилизации нормальных смещений от приложенной нормальной нагрузки прикладывалось сдвиговое усилие. Смещение сдвига задавалось с постоянной скоростью, и увеличивалось до тех пор, пока не будет достигнуто предельное или остаточное касательное напряжение. Скорость сдвига составляла 0,2 мм/мин. Проводились непрерывные измерения сдвигового и нормального усилий, сдвигового и нормального перемещений с частотой 10 Гц.

Образцы с нарушениями сплошности из аргиллита подготавливали путем предварительного раскалывания на 2 части бразильским методом. Отбирались образцы с удовлетворительно сопрягающимися нарушениями сплошности (с отсутствием выбоин). Для поверхностей этих образцов были определены значения коэффициента шероховатости поверхности *JRC* по формуле [4] путем оцифровки поверхностей с помощью лазерного 3-D сканера Rangevision PRO 5M с шагом сканирования 1 мм.

Для испытаний были скомплектованы 3 следующие группы образцов: 1) $JRC_1=0,9; 1,4; 1,9$ (среднее значение $JRC_1=1,4$); 2) $JRC_2=4,9; 5,7; 6,4$ (среднее значение $JRC_1=5,7$); 3) $JRC_3=10,9; 12,1; 14,6$ (среднее значение $JRC_1=12,5$). Было проведено 9 испытаний при

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

сдвиговом деформировании образцов при граничном условии CNL с тремя стадиями нагружения при значениях нормального сжимающего напряжения: 0,3; 0,6 и 0,9 МПа.

Несмотря на разброс свойств, характерный для природных образцов горных пород вследствие их неоднородности, были выявлены следующие закономерности деформационного процесса:

1. С увеличением коэффициента шероховатости возрастает величина сцепления: при $JRC_1=1,4$ сцепление составляет $C_0=0,022$ МПа, при $JRC_1=5,7$ – $C_0=0,091$ МПа, при $JRC_1=12,5$ – $C_0=0,304$ МПа; для угла внутреннего трения зафиксированы незначительные изменения.

2. Для образцов с невысокими средними значениями коэффициента шероховатости $JRC_1=1,2$ на зависимости «касательное напряжение–сдвиговое перемещение» в окрестности предельного касательного напряжения наблюдается горизонтальный участок на каждой стадии сдвига. Значения предельного касательного напряжения составляют на первой стадии $0,21\div 0,22$ МПа и на последующих 2-х стадиях возрастают примерно на такую же величину ($1,8\div 0,2$ МПа).

3. Для образцов со значениями коэффициента шероховатости $JRC_2=5,7$ в большинстве случаях невозможно было определить пиковое касательное напряжение, т.к. после окончания линейной стадии деформирования напряжение продолжало возрастать. Величина прироста касательного напряжения до «пикового» значения (или до точки излома кривой) на различных стадиях сдвига составляла от 60 до 110% от величины предельного напряжения на 1-й стадии. Сдвиговые перемещения на каждой стадии нагружения были существенно меньше, чем при $JRC_1=1,4$.

4. Для образцов со значениями коэффициента шероховатости $JRC_3=12,5$ на зависимости «касательное напряжение–сдвиговое перемещение» наблюдается существенно нестабильный характер сдвигового деформирования, пилообразный вид кривой, резкие падения напряжения на постпиковом участке; при этом, характер кривых «касательное напряжение–сдвиговое перемещение» на разных стадиях сдвига имеет значительные различия, что, видимо, связано с механизмом разрушения пиков шероховатости; величина прироста предельного напряжения на 2-й и 3-й стадии относительно значения на 1-й стадии имеет значительный разброс – до 400%.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-08-00915) на оборудовании ЦКП геомеханических, геофизических и геодинамических измерений СО РАН.

1. ASTM D 5607 – 9502. Standard Test Method for Performing Laboratory Direct Shear Strength Tests of Rock Specimens Under Constant Normal Force.
2. Muralha J., Grasselli G., Tatone B., Blumel M., Yujing P., Chryssanthakis J.. ISRM Suggested Method for Laboratory Determination of the Shear Strength of Rock Joints: Revised Version. Rock Mechanics and Rock Engineering, 2014, Vol. 47, Iss.1, pp. 291–302.
3. Усольцева О. М., Цой П. А., Семенов В. Н. Экспериментальное исследование деформационно-прочностных свойств горных пород с нарушениями сплошности в условиях прямого сдвига // Интерэкспо ГЕО-Сибирь–2018: 14 междунар. науч. конгр. Недропользование. Горное дело. Направления и технологии поиска, разведки и разработки месторождений полезных ископаемых. Экономика. Геоэкология: междунар. науч. конф., Новосибирск, 23–27 апр. 2018 г. : сб. материалов : в 6 т. – Новосибирск : СГУГиТ, 2018. – Т. 6. – С. 227-236. DOI: 10.18303/2618-981X-2018-6-227-236.
4. Tse R., Cruden D. Estimating joint roughness coefficients. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts. 1979, Volume 16, Issue 5, P. 303-307.

DOI: 10.17223/9785946218412/64

**КАРТИНЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ
РАСТЯЖЕНИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СТАЛИ ГАДФИЛЬДА ПРИ
ПОНИЖЕННОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ**

¹Колосов С.В., ¹Баранникова С.А., ¹Зуев Л.Б.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

При обобщении результатов исследований ГЦК, ОЦК и ГПУ металлов и сплавов, выполненных с использованием методики двухэкспозиционной спекл-фотографии [1], было установлено существование четырех типов паттернов локализации деформации, соответствующих вполне определенным стадиям пластического течения. Деформационные структуры в виде уединенного фронта, подвижных и стационарных диссипативных структур были интерпретированы как различные варианты автоволновых процессов в нелинейной среде. Настоящая работа посвящена исследованию параметров картин локализации пластической деформации при пониженной температуре.

Образцы высокомарганцовистой аустенитной стали с содержанием углерода ~ 1 масс.% гомогенизировались в инертном газе при 1373 К, а затем закаливались в воде после выдержки 1 час от той же температуры 1373 К. Размеры рабочей плоскости образцов составляли 25×5 мм². Толщина образцов – 1,5 мм. Были исследованы образцы ориентации вдоль направлений [012], [123]. Подготовленные образцы подвергались растяжению на испытательной машине «Instron-1185» со скоростью $1.33 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$, находясь в прозрачной колбе при температуре -80° С, которая поддерживалась с помощью непрерывной подачи паров азота из сосуда Дьюара. Температуру измеряли с помощью термопары, находящейся внутри сосуда около образца. Скорость подачи паров азота задавали при помощи нагревательного элемента, находящегося внутри сосуда Дьюара. Начиная с предела текучести периодичностью 30 с (через 0.4% общей деформации), регистрировались поля перемещений методом спекл-интерферометрии. Затем путем численного дифференцирования по координатам полей $r(x,y)$ вычислялись распределения продольных, поперечных, сдвиговых и поворотных компонент тензора пластической дисторсии β_{ij} для всех точек наблюдаемой поверхности образца. Дополнительно исследовались картины следов двойникования на рабочей плоскости с целью установления действующих систем.

В работе проведено сравнение параметров картин локализации пластической деформации при растяжении при пониженной и комнатной температурах. Показано, что понижение температуры до 188 К при растяжении монокристаллов стали Гатфильда ориентированных вдоль направлений [012], [123] уменьшает степень деформации скольжением, предшествующую двойникованию; двойникование развивается преимущественно в одной системе, что отражается на стадийности кривых деформационного упрочнения. При сопоставлении данных параметров паттернов локализации пластической деформации, регистрируемых при комнатной температуре, отмечено уменьшение скорости распространения и пространственного периода локальных деформаций на стадии линейного деформационного упрочнения при понижении температуры.

Работа выполнена в рамках гранта Российского научного фонда № 16-19-10025-П.

1. Баранникова С.А., Зуев Л.Б., Данилов В.И. // ФТТ. 1999. Т. 41. № 7. С. 1222.

DOI: 10.17223/9785946218412/65

**ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ ВАНАДИЕМ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И
МИКРОТВЕРДОСТЬ СТАЛИ С ВЫСОКОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ АТОМОВ
ВНЕДРЕНИЯ ПОСЛЕ КРУЧЕНИЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ**

Майер Г.Г., Москвина В.А., Астафурова Е.Г.

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия

galinazg@yandex.ru

В работе проводили исследования фазового состава и микротвердости аустенитных хромомарганцевых сталей с высокой концентрацией атомов внедрения Fe-23Cr-19Mn-0,2C-0,5N (мас.%) (без ванадия) и Fe-18Cr-23Mn-2,6V-0,3C-0,8N (мас.%) (с ванадием) после кручения под высоким давлением (КВД) на разные степени деформации. Исходное состояние стали получали закалкой в воду после выдержки при $T=1200^{\circ}\text{C}$ в течение 1 часа. В закаленном состоянии стали имели структуру преимущественно аустенита. Сталь, легированная ванадием, также содержала карбонитриды хрома и ванадия и небольшую долю α' -фазы ($\approx 4\%$). Параметр решетки исходной аустенитной фазы для обеих сталей составлял 0,3630 нм, что свидетельствовало о высокой концентрации атомов внедрения в твердом растворе. КВД стальных дисков осуществляли при комнатной температуре, при давлении 6 ГПа на $N=0$ (осадка), $N=1/4$, $N=1/2$ и $N=1$ оборот.

КВД обеих сталей вызывает уменьшение интенсивности, уширение и смещение рентгеновских линий относительно исходных положений до деформации. Характер рентгенограмм указывает на формирование разориентированной поликристаллической структуры в процессе деформирования. После КВД изменение фазового состава сталей не происходит, на рентгенограммах наблюдали отражения, соответствующие аустениту (обе стали), карбонитридам $(\text{Cr},\text{V})(\text{C},\text{N})$ и α' -фазе (для стали с ванадием). Независимо от состава стали увеличение степени деформации при КВД сопровождалось увеличением значений микродеформации кристаллической решетки до $\Delta d/d=5,0 \times 10^{-3}$ ($N=1$) в сравнении с закаленным состоянием $\Delta d/d=4,0 \times 10^{-4}$. При увеличении степени деформации параметр решетки стали изменяется слабо относительно исходных значений, что свидетельствует о том, что концентрация атомов внедрения в твердом растворе остается постоянной в процессе деформации методом КВД.

После деформации на один полный оборот для обеих сталей отмечали смещение $(111)_{\gamma}$ рентгеновских линий в область больших углов, а линий $(200)_{\gamma}$, напротив, в область меньших углов. Это указывает на рост внутренних напряжений и увеличение концентрации дефектов упаковки в структуре стали при пластической деформации. Оценка изменения величины концентрации дефектов упаковки со степенью деформации показала, что она возрастает от 4,0% ($N=1/4$) до 11,0% ($N=1$) в стали без ванадия и от 1,5% ($N=1/4$) до 7,0% ($N=1$) в стали с ванадием. Различия в величинах концентрации дефекта упаковки указывает на то, что легирование ванадием снижает склонность стали к образованию дефектов упаковки и реализации механического двойникования.

Деформация обеих сталей приводит к повышению значений микротвердости образцов по сравнению с исходными состояниями. Увеличение микротвердости со степенью деформации происходит немонотонно – на начальных этапах деформирования она изменяется быстрее, а затем выходит на насыщение. Значения микротвердости стали, легированной ванадием, выше как в исходном, так и в состояниях после КВД в сравнении со значениями стали без ванадия. Наибольшие значения микротвердости достигаются после $N=1/4$ (6,5 ГПа) для стали с ванадием и после $N=1/2$ (6,0 ГПа) для стали без ванадия. Различный уровень микротвердости сталей обусловлен различным вкладом от твердорастворного упрочнения, субструктурного упрочнения и дисперсионного твердения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Президента РФ (МК-2086.2019.8) на 2019-2020 гг.

DOI: 10.17223/9785946218412/66

**ЗАКОНОМЕРНОСТИ НАКОПЛЕНИЯ И ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ В ПРОЦЕССЕ
ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ СПЛАВОВ VT1-0 И Zr-1Nb В
КРУПНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ СОСТОЯНИЯХ**

^{1,2}Шаркеев Ю.П., ¹Легостаева Е.В., ^{2,3}Вавилов В.П., ³Скрипняк В.А., ¹Белявская О.А.,
²Чулков А.О., ³Козулин А.А., ³Скрипняк В.В., ¹Ерошенко А.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

³*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

В работе представлены результаты исследования процессов накопления и диссипации энергии в процессе пластической деформации образцов сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в крупнокристаллическом (КК) и ультрамелкозернистом (УМЗ) состояниях.

УМЗ структура в образцах сплавов VT1-0 и Zr-1Nb была получена комбинированным методом интенсивной пластической деформации, который включал abc-прессование и многоходовую прокатку в ручьевых валках с последующим дорекристаллизационным отжигом. Для формирования КК состояния был применен рекристаллизационный отжиг образцов в УМЗ состоянии.

Анализ полученных данных показал, что удельная работа пластической деформации при растяжении исследуемых сплавов в КК состоянии существенно выше по сравнению с УМЗ состоянием, что обусловлено их высокой пластичностью. Для титана VT1-0 в КК состоянии $\sigma_g = 0,5$ ГПа, $\varepsilon_f = 25\%$, а в УМЗ состоянии $\sigma_g = 1$ ГПа, $\varepsilon_f = 11\%$. Для сплава Zr-1Nb в КК состоянии $\sigma_g = 0,45$ ГПа, $\varepsilon_f = 28,5\%$, а в УМЗ состоянии $\sigma_g = 0,75$ ГПа, $\varepsilon_f = 12,5\%$. Предельная удельная работа пластической деформации вплоть до разрушения составляет 110 и 115 МДж/м³ соответственно для сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в КК состоянии, и 85 и 90 МДж/м³ соответственно для сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в УМЗ состоянии. При этом, количество теплоты, выделившееся в результате термопластического эффекта для образцов сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в КК состоянии составляет ~ 50 % от работы пластической деформации, остальные ~ 50% энергии поглощаются материалом.

Для образцов сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в УМЗ состоянии количество выделившейся при деформации теплоты неравномерно на разных участках деформирования. На начальном этапе деформирования, до $\varepsilon_{true} \sim 0,04$, количество, выделившейся при деформации теплоты не превышает 1 %, т.е. практически 100 % работы пластической деформации поглощается материалом. Это свидетельствует о способности сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в УМЗ состоянии более эффективно задействовать структурный канал поглощения энергии при деформировании по сравнению с КК состоянием. В дальнейшем количество теплоты, выделившееся в результате термопластического эффекта, достигает ~ 70 % от работы пластической деформации и составляет 60 и 65 МДж/м³ соответственно для сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в УМЗ состоянии. Удельная энергия, поглощенная материалом достигает ~ 30 % от работы пластической деформации и составляет 25 МДж/м³ для сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в УМЗ состоянии, что обусловлено некоторым разупрочнением исследуемых сплавов в УМЗ состоянии перед разрушением.

Таким образом, применение комплексного подхода на основе анализа деформационных и температурных кривых позволило получить новые экспериментальные данные, свидетельствующие о существенном влиянии УМЗ состояния на развитие процессов накопления и диссипации энергии при пластической деформации в образцах сплавов VT1-0 и сплаве Zr-1Nb.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы фундаментальных научных исследований СО РАН на 2017-2020 годы III.23.2.

DOI: 10.17223/9785946218412/67

**ВЛИЯНИЕ ИОННО-ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКИ НА МИКРОМЕХАНИЧЕСКИЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИЦИОННЫХ СЛОЕВ АУСТЕНИТНОЙ
НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ С РАЗНЫМ РАЗМЕРОМ ЗЕРНА**

¹Москвина В.А., ¹Астафурова Е.Г., ²Рамазанов К.Н., ¹Майер Г.Г., ¹Астафуров С.В.,
¹Мельников Е.В., ¹Панченко М.Ю., ^{1,3}Загибалова Е.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

²*Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, Россия*

³*НИ Томский политехнический университет, Томск, Россия*

Одна из основных проблем аустенитных нержавеющей сталей (АНС) – низкие прочностные свойства и износостойкость – может быть частично или полностью устранена путем модификации поверхности изделий и создания упрочненных поверхностных слоев [1]. Доступным и эффективным методом поверхностного упрочнения сложных деталей конструкций является ионно-плазменное насыщение сплавов атомами внедрения, которое проводится в смеси газов различного состава. При этом, механические и пластические свойства обработанных материалов определяются комплексом свойств базового сплава и упрочненной поверхности, и разделить эти вклады не всегда возможно. Метод наноиндентирования позволяет установить локальные механические и пластические характеристики отдельных областей упрочненных материалов (поверхностных слоев) путем динамического нагружения локальных участков микроскопического объема [2,3].

В настоящей работе с использованием метода наноиндентирования были установлены микромеханические характеристики композиционных слоев, сформированных в результате ионно-плазменного поверхностного насыщения в смеси газов Ar+N₂+C₂H₂ образцов стабильной АНС 01X17Н13М3 с разным размером зерна.

Исходные гомогенизированные заготовки АНС Fe-17Cr-13Ni-1.7Mn-2.7Mo-0.5Si-0.01C (мас. %) подвергали термомеханическим обработкам (ТМО) по разным схемам: прокатка при комнатной температуре (Т_к) до степени обжатия $\varepsilon = 80\%$ и последующий отжиг при 900°C (2 мин.) (ТМО-1); прокатка до $\varepsilon = 80\%$ при Т_к и отжиг при 1000°C (7 мин.) (ТМО-2); прокатка до $\varepsilon = 40\%$ при Т_к и отжиг при 1050°C (5 ч.) (ТМО-3). После ТМО из заготовок вырезали образцы с линейными размерами 1.7×2.7×18 мм. Ионно-плазменную обработку (ИПО) проводили на модернизированной установке ЭЛУ-5 в смеси газов Ar(70 %) + N₂(25 %) + C₂H₂(5 %), давлении 300 Па, температуре насыщения 540°C в течение 12 часов. Размер зерна образцов после ТМО определяли методом секущих по изображениям, полученным методом световой микроскопии (Альтами МЕТ 1С). Динамическое наноиндентирование осуществляли с применением индентора Виккерса при постоянной нагрузке 3 мН (CSEM Nano Hardness Tester). Обработку полученных данных осуществляли с применением методики расчета Оливера-Фарра [2]. Измерения проводили от обработанной поверхности к центру образцов. Пластические характеристики поверхностных слоев образцов стали после ИПО были рассчитаны с применением подхода, предложенного Ю. Мильманом [4].

ТМО по разным схемам способствует формированию равновесной зеренной структуры в стали: мелкокристаллической с размерами зерен $d = 3$ мкм (ТМО-1) и $d = 7$ мкм (ТМО-2) и крупнокристаллической с $d = 70$ мкм (ТМО-3). Анализ диаграмм нагружения показал, что максимальная глубина проникновения индентора (h_{\max}) в материал зависела от размера зерна как $h_{\max 1} < h_{\max 2} < h_{\max 3}$ для ТМО-1, ТМО-2 и ТМО-3 образцов, соответственно. С увеличением размера зерна стали значение нанотвердости уменьшается. Для мелкокристаллических образцов нанотвердость составляет HV=3.2 ГПа и HV=2.9 ГПа, а для крупнокристаллической HV=2.7 ГПа. Эти различия обусловлены разной объемной долей границ зерен и плотностью дефектов кристаллического строения в образцах после ТМО по разным режимам.

Независимо от режима ТМО на поверхности образцов, подвергнутых ИПО в смеси газов, образуется гетерофазный композиционный слой толщиной $\approx 12-17$ мкм (ТМО-1, ТМО-2) и ≈ 25 мкм (ТМО-3). Нанотвердость изменяется нелинейно в зависимости от расстояния от

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

обработанной поверхности вглубь образцов. Анализ профилей распределения нанотвердости по глубине позволил выявить три характерные области, типичные для всех образцов независимо от их размера зерна: композиционный слой, диффузионную зону и матрицу. С увеличением размера зерна толщина композиционного слоя и диффузионной зоны увеличиваются. После ИПО образцы ТМО-3 с крупнокристаллической структурой характеризуются наибольшими значениями нанотвердости в композиционном слое $HV=17$ ГПа по сравнению с образцами с мелкокристаллическими структурами $HV=12$ ГПа (ТМО-1) и $HV=10$ ГПа (ТМО-2). Высокие значения нанотвердости в композиционных слоях обусловлены комплексным упрочнением образцов: твердорастворным упрочнением аустенита азотом и углеродом, дисперсионным твердением - образованием нитридов и карбонитридов различного состава. После ИПО для образцов с мелкокристаллическими структурами характерен значительный разброс значений нанотвердости в композиционных слоях по сравнению с крупнокристаллическими образцами. Это может быть связано с увеличением объемной доли границ зерен, которые являются наиболее благоприятными местами для зарождения нитридных и карбонитридных фаз в образцах [1]. По мере продвижения от композиционного слоя к матрице значения нанотвердости постепенно снижаются для всех образцов. Диффузионная зона в ТМО-3 образцах достигает ≈ 50 мкм, и уменьшается на десятки микрометров с уменьшением размера зерна (≈ 30 мкм и ≈ 35 мкм для образцов ТМО-1 и ТМО-2, соответственно). Пластические характеристики в матрицах для образцов с разным размером зерна примерно одинаковы. В образцах после ИПО пластические характеристики композиционных слоев различаются и с увеличением толщины композиционного слоя уменьшаются, а также имеют низкую деформационную способность из-за наличия нитридных и карбонитридных фаз. Вид кривых нагрузки-разгрузки также свидетельствует о наличии трех характерных областей после ИПО в образцах с разным размером зерна. Для всех типов образцов площадь под кривыми в упрочненном слое и в диффузионной зоне увеличивается по мере продвижения от композиционного слоя к матрице. Постепенное уменьшение значений нанотвердости и увеличение площади под кривыми нагружения возникает в результате того, что по мере удаления от поверхностного композиционного слоя вглубь образца вклад соотношения дисперсионного твердения уменьшается и превалирует твердорастворное упрочнение (диффузионная зона) [5].

Таким образом, для образцов аустенитной нержавеющей стали 01X17H13M3 с разной объемной долей границ зерен и после ионно-плазменной обработки в смеси газов аргона, азота и ацетилена показана зависимость диаграмм нагружения при наноиндентировании, величин нанотвердости и пластических характеристик композиционных слоев в зависимости от расстояния до обрабатываемой поверхности.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента РФ (СП-14.2019.1).

1. Lo K.H., Shek C.H., Lai J. K.L. Recent development in stainless steels // Mat. Sci. and Eng.: R: Reports. 2009. Vol. 65. P. 39–104.
2. Oliver W.C., Pharr G.M. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments // J. Mater. Res.: 1992. Vol 7. P. 1564–1583.
3. Головин Ю.И., Наноиндентирование и механические свойства твердых тел в субмикроразмерах, тонких приповерхностных слоях и пленках // Физика твердого тела: 2008. том 50. вып. 12. С. 2113–2142.
4. Yu. V. Milman, B. A. Galanov, S. I. Chugunova. Plasticity characteristic obtained through hardness measurement // Acta metall, mater.: 1993. Vol 41 (9). P. 2523–2532.
5. Moskvina V., Astafurova E., Maier G., et al. A role of initial microstructure in characteristics of the surface layers produced by ion-plasma treatment in CrNiMo austenitic stainless steel // Mat. Charact. 2019. Vol. 153. P. 372–380.

DOI: 10.17223/9785946218412/68

**ВЫЯВЛЕНИЕ ОРГАНИЗАЦИИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В
ЗАВИСИМОСТИ ОТ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО НАПРАВЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ
СПЛАВА Cu-1,5Co-3Al ПРИ ТРЕНИИ СКОЛЬЖЕНИЯ**

¹Княжев Е.О., ²Калашникова Т.А., ²Чумаевский А.В.

¹Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Металлы и сплавы подвергаются деформированию под действием приложения внешних сил, таких, как растяжение, сжатие или трение. Под действием нагрузки происходит упругая деформация, которая при увеличении степени деформации переходит в пластическую. При увеличении нагружающего усилия происходит дальнейшее пластическое деформирование материала и разрушение. Важную роль в процессе деформации и разрушения материалов играет кристаллографическая ориентация зерен относительно приложенного усилия. Поэтому необходимо понимание процесса пластической деформации и её механизмов на различных структурно-масштабных уровнях в зависимости от ориентации приложения внешнего воздействия. Одним из способов установления механизмов деформации в кристаллических твердых телах в зависимости от кристаллографической ориентации является проведение модельных испытаний с использованием монокристаллических материалов. Целью работы является исследование деформационного поведения монокристаллов в зависимости от кристаллографического направления оси деформации при сложнонапряженном состоянии в условиях трения скольжения.

В качестве исследуемых кристаллографических ориентировок были выбраны монокристаллы бронзы состава Cu-1,5Co-3Al ориентации $[110]$ и $[\bar{1}11]$ и ориентаций, близких к указанным, но с отклонением от них. Это связано с тем, что именно эти ориентации обладают областями «облегченного сдвига» для $[110]$, и областями «стесненного сдвига» для $[\bar{1}11]$. Это условие для того, чтобы проявлялось наличие макрополос деформации и складок на боковых гранях образцов при сжатии. Применительно к нагружению от силы трения данные ориентации обладают различными параметрами устойчивости к отделению частиц износа и фрагментации в поверхностных слоях, как показано в ранее проводимых работах по исследованию трибологического поведения монокристаллов меди.

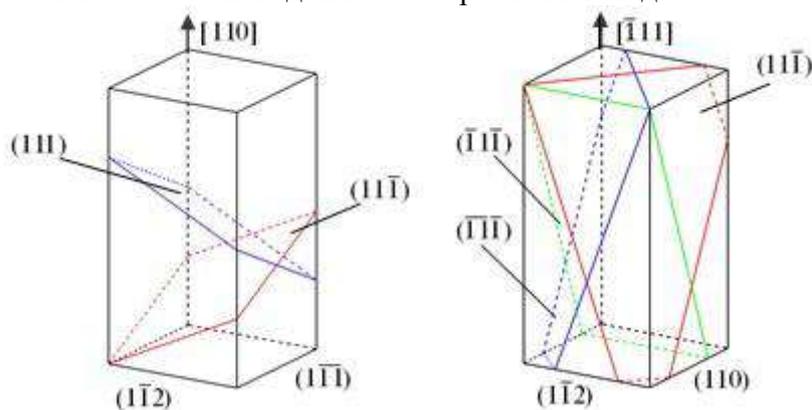


Рис. 1. Плоскости скольжения $[110]$ -монокристалла (слева) и $[\bar{1}11]$ -монокристалла (справа)

Основными элементами деформации являются различные доменные структуры: системы прямолинейных систем сдвига, системы мезопачек плоскостей сдвига, системы макрополос сдвига, пересекающиеся следы скольжения и т.д. На поверхности деформация проявляется, как складки и системы складок различного масштабного уровня. Кристаллографическое направление при сжатии и трении играет важную роль, так как оно определяет картину пластической деформации. Она определяет то, по каким системам плоскостей сдвига будет проходить пластическая деформация (рис.1), а также развитие

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

макрополос сдвига и систем мезопачек на поверхности образца, пересекающихся следов и складок.

Проведенные исследования показали, что в процессе пластической деформации в подповерхностной области монокристаллов бронзы происходит образование структур, аналогичных наблюдаемым при деформации монокристаллов меди в условиях трения скольжения. При отклонении от кристаллографической ориентации происходит изменение распределения следов сдвига в приповерхностной зоне. Изменение параметров процесса трения (скорости скольжения, силы нормального давления) приводит к изменению глубины деформированного слоя и распределения следов сдвига в зоне пластической деформации. Изменение направления силы трения приводит к изменению задействованных в деформации систем сдвига. Таким образом, в работе рассмотрены основные закономерности развития процесса пластической деформации монокристаллической бронзы в условиях фрикционного взаимодействия при трении скольжения.

DOI: 10.17223/9785946218412/69

**ПРОВЕРКА СПРАВЕДЛИВОСТИ ЗАКОНА ПЭРИСА ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ РОСТА
ТРЕЩИНЫ ПРИ ГИГАЦИКЛОВОЙ УСТАЛОСТИ**

Баяндин С.Р.

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь
Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь*

Усталость – явление, при котором в ходе циклического нагружения и при приложенных напряжениях ниже предела статической прочности, материал может разрушиться после некоторого числа циклов. Экспериментальному [1-2] и теоретическому [3-4] исследованию усталостного разрушения металлов и сплавов посвящен ряд работ. Выделяют мало- (10^1 - 10^4 циклов), много- (10^4 - 10^7 циклов) и гигацикловую (10^8 - 10^{10} циклов) усталость. В случае гигацикловой усталости амплитуды напряжений существенно ниже предела текучести и материал разрушается после 10^8 - 10^{10} циклов. При этом трещина образуется внутри материала (под поверхностью). Поэтому данный тип разрушения является наиболее опасным.

Так как процесс гигациклового нагружения требует огромных временных затрат, рассматривается задача роста подповерхностной трещины после её образования. Диаметры трещины варьировались от 0,1 до 2 мм. В качестве исследуемого материала был выбран сплав АМгб. Его свойства [5-8]: $\sigma_T = 165$ МПа; $\sigma_B = 350$ МПа; $E = 71$ ГПа; $\nu = 0,3$; $\rho = 2640$ кг/м³; $\varepsilon_f = 0,2$; $d = 4,2$; $T_m = 660$ °С $T_t = 25$ °С; $c = 922$ Дж/(К·кг); $\beta = 0,9$; $\alpha = 0$ (в [8] показано, что для скоростей деформации 300 с⁻¹ и выше теплопроводностью для сплава АМгб можно пренебречь. Согласно [6, 7] в исследуемых диапазонах скоростей деформации скоростной чувствительностью материала АМгб можно пренебречь).

Для описания поведения сплава АМгб использовалась упругопластическая модель с разрушением:

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1)$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \nabla), \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_s + \boldsymbol{\sigma}_d, \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_s = \frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{E}) \mathbf{E}, \quad (4)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p, \quad (5)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda(\boldsymbol{\varepsilon}^e : \mathbf{E}) \mathbf{E} + 2G\boldsymbol{\varepsilon}^e, \quad (6)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^p = \frac{3}{2} \frac{\sqrt{\boldsymbol{\varepsilon}^p : \boldsymbol{\varepsilon}^p}}{\sqrt{\boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\sigma}_d}} \boldsymbol{\sigma}_d, \quad (7)$$

$$\sqrt{\frac{3}{2}(\boldsymbol{\sigma}_d - k\boldsymbol{\varepsilon}^p) : (\boldsymbol{\sigma}_d - k\boldsymbol{\varepsilon}^p)} = \sigma_T, \quad (8)$$

$$\rho c \dot{T} = \beta \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}^p + \alpha \Delta T, \quad (9)$$

$$\varepsilon_{eq}^p \geq \varepsilon_f \left(1 + d \frac{T - T_t}{T_m - T_t} \right), \quad (10)$$

$$\varepsilon_{eq}^p = \int_0^{t_i} \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p} dt, \quad (11)$$

Проведена серия расчётов для начальных диаметров трещины 0,1, 1, 1,5 и 2 мм. Во всех случаях амплитуда напряжений 138 МПа. В результате показано, что при начальном диаметре 2 мм трещина доросла до поверхности за 59 циклов, при 1,5 мм – за 100 циклов проросла на 0,465 мм, при 1 мм – на 0,218 мм, при 0,1 мм трещина не начала расти.

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

В [9] предложена зависимость для прогнозирования роста усталостной трещины:

$$\frac{da}{dN} = l_{sc} \left(\frac{\Delta K}{E \sqrt{l_{sc}}} \right)^\alpha \left(\frac{L_{pz}}{l_{sc}} \right)^\beta, \quad (12)$$

Согласно (12) рост трещины не должен происходить за 100 циклов ни при одном из начальных диаметров, исследуемых в настоящей работе. Однако, численное моделирование подтверждает предложенную зависимость лишь при начальном размере трещины 0,1 мм. Подобное несоответствие может иметь ряд объяснений. Многие исследователи [10] отмечают, что закон Пэриса работает лишь в ограниченной области, прилегающей к очагу зарождения трещины в объёме материала и способен описывать лишь линейный участок зависимости скорости роста трещины от коэффициента интенсивности напряжений. Ряд несоответствий может быть связан с геометрическими особенностями расположения трещины, которые не могли быть учтены в осесимметричной постановке.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 18-72-00142.

1. Оборин В.А., Банников М.В., Баяндин Ю.В., Соковиков М.А., Билалов Д.А., Наймарк О.Б. Фрактальный анализ поверхности разрушения сплава АМг6 при усталостном и динамическом нагружении // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2015. – № 2. – С. 116–126.
2. Наймарк О.Б., Банников М.В. Нелинейная кинетика развития поврежденности и аномалии упругих свойств металлов при гигацикловом нагружении // Письма о материалах. – 2015. – Т. 5, № 4 (20). – С. 497-503.
3. Волков И.А., Коротких Ю.Г., Панов В.А., Шишулин Д.Н. Моделирование процессов накопления усталостных повреждений в конструкционных сталях при блочном малоцикловом нагружении // Вычислительная механика сплошных сред. – 2014. – Т. – 7, № 1. – С. 15-22.
4. Билалов Д.А., Баяндин Ю.В., Наймарк О.Б. Математическое моделирование процесса разрушения сплава АМг2.5 в режиме много- и гигацикловой усталости // Вычислительная механика сплошных сред. – 2018. – Т. 11, № 3. – С. 323-334.
5. Машиностроение. Том II-3: Цветные металлы и сплавы. Композиционные металлические материалы / Под общ. ред. К.В. Фролова. – М.: Машиностроение, 2001. – 880 с.
6. Глушак Б.Л., Игнатова О.Н., Пушков В.А., Новиков С.А., Гирин А.С., Сеницын В.А. Динамическое деформирование алюминиевого сплава АМг-6 при нормальной и повышенной температурах // Прикладная механика и техническая физика. – 2000. – Т. 41, № 6. – С. 139-143.
7. Билалов Д.А., Соковиков М.А., Чудинов В.В., Оборин В.А., Баяндин Ю.В., Терёхина А.И., Наймарк О.Б. Исследование локализации пластического сдвига в алюминиевых сплавах при динамическом нагружении // Вычислительная механика сплошных сред. – 2015. – Т. 8, № 3. – С. 319-328.
8. Билалов Д.А., Соковиков М.А., Чудинов В.В., Оборин В.А., Баяндин Ю.В., Терёхина А.И., Наймарк О.Б. Численное моделирование и экспериментальное исследование локализации пластической деформации при динамическом нагружении образцов в условиях близких к чистому сдвигу // Вычислительная механика сплошных сред. – 2017. – Т. 10, № 1. – С. 103-112.
9. Оборин В.А., Баяндин Ю.В., Билалов Д.А., Соковиков М.А., Чудинов В.В., Наймарк О.Б. Автомодельные закономерности развития поврежденности и оценка надежности сплавов АМг6 и Д16Т при комбинированном динамическом и гигацикловом нагружении // Физическая мезомеханика. – 2018. – Т. 21, № 6. – С. 135-145.
10. Bathias, C. Gigacycle Fatigue in Mechanical Practice / C. Bathias, P. C. Paris. – Marcel Dekker Publisher Co. – 2005. – 328 p.

DOI: 10.17223/9785946218412/70

**ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ СПЛАВА ВТ6 НА ЕГО МЕХАНИЧЕСКИЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ И ПЛАСТИЧЕСКУЮ ДЕФОРМАЦИЮ В ПРОЦЕССЕ СКРЕТЧ-
ТЕСТИРОВАНИЯ**

Шугуров А.Р., Казаченок М.С., Мартынов С.А., Кастеров А.М.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Высокое отношение механических характеристик к плотности, низкая теплопроводность, жаропрочность, высокая коррозионная стойкость и биосовместимость титана и сплавов на его основе способствуют все более широкому их применению в авиации, ракетной технике, химическом машиностроении, судостроении, медицинской промышленности и т.д. Одним из наиболее перспективных титановых сплавов является сплав ВТ6, содержащий 6 вес.% Al и 4 вес. % V. Структура данного сплава представляет собой смесь низкотемпературной ГПУ α -фазы и высокотемпературной ОЦК β -фазы, что обеспечивает его повышенные прочность и пластичность. Для дополнительного повышения механических характеристик сплава ВТ6 разработано огромное количество различных методов механической и термической обработки, что в условиях наличия двух фаз обуславливает большой интервал изменения их количественного соотношения, возможность образования метастабильных фаз, а также широкий диапазон размеров и формы элементов микроструктуры.

Как и в случае других титановых сплавов, основными недостатками сплава ВТ6 являются его низкая износостойкость и плохая обрабатываемость резанием. Учитывая большое разнообразие структуры сплава ВТ6, формирующейся в результате его термомеханической обработки, для повышения его трибологических характеристик необходимо детальное исследование влияния структуры на его механические свойства и закономерности изнашивания. При этом особый интерес представляет изучение зарождения дефектов и пластического оттеснения материала при нагружении отдельных структурных элементов поликристалла, то есть процессов, развивающихся в области трибологического контакта на микро- и наномасштабном уровнях, поскольку они в значительной степени определяют механическое поведение материала в целом. Эффективными методами изучения подобных процессов являются наноиндентирование и скретч-тестирование, которые позволяют исследовать локальные механические и трибологические свойства твердых тел. Целью настоящей работы является изучение влияния структуры сплава ВТ6 на его механические характеристики и закономерности пластической деформации при скретч-тестировании.

Образцы для исследований представляли собой пластины из сплава ВТ6, подвергнутые механической шлифовке и последующей электролитической полировке. Были изучены образцы, полученные горячей прокаткой в состоянии поставки, после отжига в вакууме при температуре 980 °С в течение 2 часов, а также подвергнутые горячему изотермическому прессованию при температуре 950 °С и последующему отжигу при 900 °С в течение 1 часа. Кристаллографическую ориентацию зерен на поверхности образцов определяли методом дифракции обратно рассеянных электронов. Измерение твердости и модуля упругости зерен T_i методом наноиндентирования, а также их скретч-тестирование проводили с помощью установки Nanotest. Топографию поверхности образцов в области царапин, сформированных с помощью скретч-тестирования, исследовали методом атомно-силовой микроскопии.

Показано, что образцы в состоянии поставки имеет глобулярную структуру с размером зерен 0,8-1,5 мкм. Сплав ВТ6 после отжига при 980 °С характеризуется структурой с крупными первичными β -зернами, внутри которых находятся пачки α -ламелей, разделенных прослойками β -фазы, имеющими общую кристаллографическую ориентацию в пределах первичного β -зерна. Средняя толщина α -ламелей составляет 1,7 мкм. Наконец, образцы, подвергнутые горячему прессованию и рекристаллизационному отжигу обладают

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

бимодальной структурой с α -зернами размером 5-15 мкм и дисперсной смесью α - и β -фаз с размерами частиц около 1 мкм.

Измерение механических характеристик методом наноиндентирования показало, что самой низкой твердостью (3,85 ГПа) характеризуются образцы с ламельной структурой. В то же время наиболее высокая твердость была выявлена у образцов с бимодальной структурой (4,51 ГПа). При этом сплав ВТ6 с бимодальной структурой обладает более низким модулем упругости (146 ГПа), чем у образцов с глобулярной и ламельной структурой (155 и 154 ГПа соответственно). Это обуславливает более высокое значение у сплава с бимодальной структурой отношения твердости к модулю упругости, которое традиционно используется для оценки предельной упругой деформации, вязкости разрушения, критической нагрузки для начала пластической деформации и износостойкости материалов.

Изучены закономерности формирования деформационного рельефа на поверхности образцов из сплава ВТ6 в процессе их скретч-тестирования. Установлено, что во всех исследованных образцах сочетание нормальной и тангенциальной нагрузок обуславливает деформацию материала по механизму пропахивания и формирование царапин на поверхности. В процессе нагружения имело место пластическое оттеснение материала из царапин перед индентором и в двух боковых направлениях, перпендикулярных направлению царапания, которое приводило к образованию навалов по краям царапин. Исследования, проведенные методом дифракции обратно рассеянных электронов, выявили, что пластическая деформация материала в процессе нагружения способствовала его фрагментации, то есть образованию в царапинах большого количества локальных областей с разориентировкой кристаллической структуры. Показано, что образцы с бимодальной структурой характеризуются существенно меньшей остаточной глубиной царапин, формирующихся в результате воздействия индентором, чем образцы с глобулярной и ламельной структурой. Это хорошо согласуется с результатами наноиндентирования и свидетельствует о высокой демпфирующей способности сплава ВТ6 в данном структурном состоянии.

Полученные результаты свидетельствуют о необходимости учета влияния структуры материалов на механизмы пластического оттеснения при прогнозировании их стойкости к царапанию, которое является аналогом абразивного изнашивания. Выявленные закономерности особенно важны для понимания процессов, развивающихся в микро- и нанотрибологии, где контактное взаимодействие, как правило, происходит в пределах одного или нескольких элементов структуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 18-48-700009.

DOI: 10.17223/9785946218412/71

**ШИРОКОДИАПАЗОННЫЕ ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ
ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ**

Билалов Д.А., Баяндин Ю.В., Наймарк О.Б.
Институт механики сплошных сред УрО РАН

В настоящей работе предлагается обобщённый вариант ранее предложенной [1] и разрабатываемой применительно к различным реализациям [2-7] математической модели деформируемого твёрдого тела с мезоскопическими дефектами. Указанная модель была успешно применена для описания деформационного поведения металлов и сплавов при статическом [2], динамическом [3, 4], ударно-волновом [5-6] и усталостном [7] нагружениях. Полная система полевых уравнений имеет следующий вид:

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1)$$

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \nabla) = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^{pl} + \dot{\mathbf{p}}, \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^R = \lambda(\mathbf{D} : \mathbf{E})\mathbf{E} + 2G(\mathbf{D} - \mathbf{D}^{pl} - \dot{\mathbf{p}}), \quad (4)$$

$$\mathbf{D}^{pl} = \dot{\epsilon}_0^{n_e} \exp\left(\frac{U(T)}{kT}\right) \left(\Gamma_\sigma \boldsymbol{\sigma}_d - \Gamma_{p\sigma} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} \right), \quad (5)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = \dot{\epsilon}_0^{n_p} \exp\left(\frac{U(T)}{kT}\right) \left(\Gamma_{p\sigma} \boldsymbol{\sigma}_d - \Gamma_p \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} \right), \quad (6)$$

$$\dot{\delta} = -\dot{\epsilon}_0^{n_\delta} \Gamma_\delta \frac{\partial F}{\partial \delta}, \quad (7)$$

$$\rho c \dot{T} = \alpha \Delta T + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^{pl} - \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} : \dot{\mathbf{p}} - \frac{\partial F}{\partial \delta} \dot{\delta}, \quad (8)$$

$$\frac{F}{F_m} = \frac{p^2}{2} - \frac{p^2}{2\delta} + c_1 p + c_2 \ln(c_3 + c_4 p + p^2) - \frac{\boldsymbol{\sigma}_d : \mathbf{p}}{2G}, \quad (9)$$

$$U(T) = \frac{k}{T_c^m} T^{m+1}, \quad \boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_s, \quad \boldsymbol{\sigma}_s = \frac{1}{3}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{E})\mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\sigma}^R = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \dot{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \dot{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{R}^T,$$

и состоит из: уравнений движения (1) и неразрывности (2), кинематического соотношения (3), закона Гука в скоростной формулировке (4), кинетических уравнений (5)-(7), уравнения теплопроводности (8), выражения для свободной энергии (9). Приняты обозначения: ρ – массовая плотность; \mathbf{v} – вектор скорости; $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений, $\boldsymbol{\sigma}_s$ и $\boldsymbol{\sigma}_d$ – его шаровая и девиаторная части; $\nabla(\cdot)$ – оператор градиента в текущей конфигурации; \mathbf{D} – тензор деформации скорости, \mathbf{D}^e , \mathbf{D}^{pl} – его упругая и пластическая составляющие; λ , G – упругие константы материала; \mathbf{E} – единичный тензор; $\dot{\epsilon}_0 = \sqrt{\frac{2}{3}} \dot{\boldsymbol{\epsilon}} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}} / \dot{\epsilon}_c$ – безразмерная интенсивность скорости деформации, $\dot{\epsilon}_c = 1 \text{ с}^{-1}$; k – константа Больцмана; δ – параметр структурного скейлинга; Γ_δ , Γ_σ , $\Gamma_{p\sigma}$, Γ_p – положительные кинетические коэффициенты; n_e , n_p , n_δ – константы, отвечающие за скоростную чувствительность материала; F – термодинамический потенциал, связанный с дефектами; \mathbf{p} – тензор плотности микросдвигов; c – удельная теплоёмкость; α – коэффициент теплопроводности; T – температура; $\Delta(\cdot)$ – оператор Лапласа; F_m , c_1 - c_4 – константы аппроксимации термодинамического потенциала F ; T_c , m – константы аппроксимации характерной энергии активации U ; \mathbf{R} – ортогональный тензор полярного разложения градиента места $\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}$, где \mathbf{U} – правый симметричный положительно определенный тензор деформации без вращений.

В качестве материала для исследования был выбран сплав АМг6, применяемый в авиамоторостроении. Известные значения для плотности, теплоемкости, теплопроводности и упругих модулей были взяты из доступных литературных данных [9]. Идентификация неизвестных параметров модели проводилась с использованием квазистатических испытаний

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

на одноосное растяжение\сжатие (определялись коэффициенты Γ_σ , $\Gamma_{p\sigma}$, Γ_p); экспериментальных данных о прочностных характеристиках при различных скоростях деформации [8] и температурах [9], дополнительно определялись константы n_ε , n_p и T_c , m соответственно. Верификацией параметров явилась способность модели предсказывать предел текучести материала при повышенных температурах и высоких скоростях деформации одновременно. В настоящее время, метод Тейлора широко используется для верификации уравнений состояния и моделей поведения материалов на основе сравнения остаточной формы образца после испытания и результатов численного расчета. Полученная форма стержня после соударения в расчёте хорошо согласуется с экспериментом.

Для моделирования разрушения был предложен следующий критерий разрушения:

$$\beta_{int}^s \geq \beta_{int}^*, \quad (10)$$

где $\beta_{int}^s = \int \beta^s d\varepsilon$, $\beta^s = 1 - \beta$ – процент запасенной энергии, β – коэффициент Тейлора-Квини, который в рамках предложенной модели может быть вычислен следующим образом [2]:

$$\beta = 1 - \frac{\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}} : \dot{\mathbf{p}}}{\boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{D}^{pl} + \dot{\mathbf{p}})}, \quad \text{где } \frac{\Psi}{F_m} = \frac{p^2}{2} - \frac{p^2}{2\delta} + c_1 p + c_2 \ln(c_3 + c_4 p + p^2)$$

Введённый критерий позволил адекватно предсказывать усталостное разрушение сплава АМг6, в том числе после предварительного динамического нагружения.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 19-79-00168.

1. Наймарк О. Б. Коллективные свойства ансамблей дефектов и некоторые нелинейные проблемы пластичности и разрушения // Физ. мезомех. – 2003. – Т. 6, № 4. – С. 45-72.
2. Костина А.А., Баяндин Ю.В., Плехов О.А. Моделирование процесса накопления и диссипации энергии при пластическом деформировании металлов // Физ. мезомех. – 2014. – Т. 17, № 1. – С. 43-49.
3. Билалов Д.А., Сокоиков М.А., Чудинов В.В., Оборин В.А., Баяндин Ю.В., Терёхина А.И., Наймарк О.Б. Исследование локализации пластического сдвига в алюминиевых сплавах при динамическом нагружении // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2015. – Т. 8, № 3. – С. 319-328.
4. Билалов Д.А., Сокоиков М.А., Чудинов В.В. и др. Численное моделирование и экспериментальное исследование локализации пластической деформации при динамическом нагружении образцов в условиях близких к чистому сдвигу // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2017. – Т. 10, № 1. – С. 103-112.
5. Bayandin Yu., Leont'ev V., Naimark O., Permjakov S. Experimental and theoretical study of universality of plastic wave fronts and structural scaling in shock loaded copper // J. De Physique. IV. – 2006. – P. 1015-1021.
6. Савельева Н.В., Баяндин Ю.В., Савиных А.С., Гаркушин Г.В., Разоренов С.В., Наймарк О.Б. Формирование упругопластических фронтов и откольное разрушение в сплаве АМг6 при ударных воздействиях // ПЖТФ. – 2018. – Т. 44, № 18. – С. 39-46.
7. Билалов Д.А., Баяндин Ю.В., Наймарк О.Б. Математическое моделирование процесса разрушения сплава АМг2.5 в режиме много- и гигацикловой усталости // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2018. – Т. 11, № 3. – С. 323-334.
8. Глушак Б.Л., Игнатова О.Н., Пушков В.А., Новиков С.А., Гиринов А.С., Сеницын В.А. Динамическое деформирование алюминиевого сплава АМг-6 при нормальной и повышенной температурах // ПМТФ. – 2000. – Т. 41, № 6. – С. 139-143.
9. Машиностроение. Том II-3: Цветные металлы и сплавы. Композиционные металлические материалы / Под общ. ред. К.В. Фролова. – М.: Машиностроение, 2001. – 880 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/72

**МЕХАНИЗМЫ РАЗРУШЕНИЯ МЕЗОУРОВНЯ МЕТАЛЛОКЕРАМИЧЕСКОГО
КОМПОЗИТА TiNi-TiB₂**

^{1,2}Макаров П.В., ²Бакеев Р.А., ¹Промахов В.В., ¹Жуков А.С.

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Изучены состав, структура и механические свойства пилотных образцов металлокерамического композита TiNi-TiB₂, полученных методом прямого лазерного выращивания. Выполнено компьютерное конструирование подобного металлокомпозита и численно изучен его механический отклик на нагружение на макро и мезоуровнях. Образцы металлокерамического композита выращивались из порошков металлокомпозита этого же состава. Материал для изготовления порошков был получен методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. Порошки сферической формы и размерами фракций 50-150 мкм получались из СВС продукта путём его многократного измельчения с последующей плазменной сфероидизацией частиц. Показано, что как частицы металлокомпозита после плазменной сфероидизации, так и конечный продукт, полученный методом прямого лазерного выращивания, полностью наследуют структуру исходного металлокомпозита, полученного СВС методом со средним размером упрочняющих частиц TiB₂ в металлической матрице TiNi не превышающим 5 мкм. Компьютерное конструирование металлокерамического композита максимально близкого по составу и структуре к полученному материалу было выполнено на основе известной структуры, механических и физических свойств исходных составляющих TiNi и TiB₂. Численно изучены особенности деформирования и разрушения образцов металлокерамического композита разного наполнения (40-60%) упрочняющими частицами в металлической матрице. Показано, что уже после 1% общей деформации образцов металлокомпозита сжатием, в металлической матрице начинают развиваться полосы локализованного сдвига. Также в матрице начинают формироваться локальные области растяжений-сдвигов, обусловленные особенностями структурной неоднородности материала. Эти области захватывают приграничные области упрочняющих частиц, вызывая их частичное разрушение. В целом, композиционный материал, как реальный, так и сконструированный в компьютере, показал высокие прочностные характеристики: 1800-2400 МПа при испытании образцов на сжатие (численное моделирование и эксперимент).

Данное научное исследование выполнено в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/73

**ВЛИЯНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА Al-Mg СПЛАВОВ НА ХАРАКТЕР
РАСПРОСТРАНЕНИЯ ДЕФОРМАЦИОННОЙ ПОЛОСЫ**

Юзбекова Д.Ю., Борисова Ю.И., Могучева А.А.
Белгородский государственный университет, Белгород

Al-Mg сплавы являются классическими представителями материалов для исследований неустойчивости пластического течения, в частности эффекта Портевена-Ле Шателье (ПЛШ) [1,2]. Данный эффект представляет сложное пространственно-временное поведение, связанное с повторяющейся локализацией деформации в деформационных полосах и сопутствующими резкими изменениями деформирующего напряжения [3,4]. Однако недавно [5] было обнаружено, что гладкое пластическое течение мелкозернистого Al-Mg сплава с очень высокой плотностью дислокаций ($\sim 10^{15} \text{ м}^{-2}$) так же может быть связано с распространением деформационных полос. Таким образом, в силу того, что свойства материала на макроуровне в значительной степени определяются его микроструктурой, возникает дополнительный интерес в изучении влияния фазового состава мелкозернистых сплавов системы Al-Mg с очень высокой плотностью дислокаций ($\sim 10^{15} \text{ м}^{-2}$) на распространение деформационных полос.

Исследованы сплавы системы Al-Mg с различным химическим составом (таблица 1).

Таблица 1. Химический состав исследуемых сплавов.

Сплав	Mg	Mn	Sc	Zr	Al.
I	3	-	-	-	ост.
II	4,57	0,35	0,2	0,09	ост.
III	5,4	0,52	-	0,1	ост.

Сплав I был получен методом полунепрерывного литья. Гомогенизационный отжиг проводили при температуре 500°C в течение 4 ч. Далее была проведена прокатка при комнатной температуре со степенью обжатия 70% и рекристаллизационный отжиг при 400°C в течении 2 часов [5]. Затем заготовки полученного сплава подвергали двухступенчатому равноканальному угловому прессованию (РКУП) при температуре 300°C до степени деформации ~ 8 и при температуре 200°C до степени деформации ~ 4 . Завершающей технологической операцией стала холодная прокатка (ХП) при комнатной температуре и степени деформации 80% [5].

Сплав II был изготовлен методом непрерывного литья. Слитки сплава II подвергали гомогенизационному отжигу при 360-380° С в течение 12 ч, а затем были прокатаны при температуре 380°C со степенью обжатия $\sim 70\%$ [6]. Для формирования мелкозернистой микроструктуры с плотностью дислокаций $\sim 10^{15} \text{ м}^{-2}$ РКУП проводили при температуре 300°C до степени деформации ~ 12 , после чего была проведена ХП при комнатной температуре и степени деформации 80%.

Сплав III, полученный методом непрерывного литья и последующей гомогенизации при температуре 360°C в течение 6 часов, был подвергнут прокатке при комнатной температуре со степенью обжатия 70% и последующему рекристаллизационному отжигу при температуре 400°C в течение 2 часов. Следующими технологическими операциями стали РКУП при температуре 300°C до степени деформации $\varepsilon \sim 12$ и ХП при комнатной температуре и степени деформации 80%.

Таким образом, интенсивная пластическая деформация (ИПД) привела к формированию микроструктуры с размером зерен $\sim 1-2 \text{ мкм}$ и плотностью решеточных дислокации $\sim 10^{15} \text{ м}^{-2}$ для всех трех исследуемых сплавов. В структуре сплава II наблюдаются частицы Al_6Mn и $\text{Al}_3(\text{Sc},\text{Zr})$, а в сплаве III были обнаружены только некогерентные частицы Al_6Mn . Испытание на растяжение проводились на плоских образцах имеющих обычную форму двусторонних лопаток с длиной рабочей части 35 мм и поперечным сечением $3 \times 7 \text{ мм}^2$. Деформация осуществлялась растяжением с постоянной скоростью на испытательной машине Zwick 1476

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

при комнатной температуре и скорости деформации $5 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Исследования динамики полос деформации проводили методом высокоскоростной видеосъемки, со скоростью 15 кадров/сек (подробности методики приведены в работе [5]).

Установлено, что обработка РКУП и последующей ХП эффективно подавляет прерывистое течение, так что наблюдается кажущийся установившийся поток. Лишь на деформационной кривой сплава III можно наблюдать проявление одного скачка выше общего уровня кривой (тип А). Интересно, что анализ карт скоростей деформации всех исследуемых сплавов показывает распространением деформационных полос, что подтверждает тот факт, что гладкое пластическое течение может быть связано с распространением деформационных полос. Так деформационная полоса сплавов I и II за все время испытания проходит не больше половины длины рабочей части, тогда как для сплава III распространение полосы деформации происходит от одного края образца к другому, то есть соответствует полной длине рабочей части.

Также отмечено, что упрочнение всех трех сплавов приводят к постепенному уменьшению средней скорости полосы и ее ширины, тогда как локальная скорость деформации внутри полосы увеличивается, что свидетельствует о более сильной локализации деформации. Еще одним важным наблюдением является то, что максимальная локальная скорость деформации внутри полос для сплавов I и II в 2 раза превышает это значение для сплава III, что объясняет их меньшую подвижность.

Кроме того, было определено, что эволюция скорости распространения полосы соответствует линейной зависимости для всех исследуемых сплавов. Распространение первой полосы деформации начинается после достижения предела упругости. Максимальная скорость распространения полосы в сплавах I, II и III составляют $\sim 6,4 \text{ мм/с}$, $\sim 7,2 \text{ мм/с}$ и $\sim 8,4 \text{ мм/с}$, соответственно. Формирование шейки коррелирует с прекращением режима распространения, который замещается локализацией деформации в ограниченной области. При этом полосы деформации выполняют медленные движения вперед и назад.

Таким образом, распространение деформационной полосы было получено во всех исследуемых сплавах независимо от фазового состава и наличия скачков напряжения течения на деформационной кривой. Тем не менее, сплав III, содержащий некогерентные частицы Al_6Mn , характеризуется наименьшей локализацией деформации и самой большой подвижностью полосы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (Соглашение № 17-72-20239) с использованием оборудования Центра коллективного пользования "Технологии и Материалы НИУ "БелГУ".

1. Halim H., Wilkinson D.S., Niewczas M. The Portevin-Le Chatelier (PLC) effect and shear band formation in an AA5754 alloy // Acta Mater. 2007. №55. С. 4151-4160.
2. Polmear I.J. Light Alloys. From Traditional Alloys to Nanocrystals, 4th ed., Butterworth-Heinemann/Elsevier 2006. С. 421.
3. Portevin A., LeChatelier F. Sur un phenomene observe lors de l'essai de traction d'alliages en cours de transformation // Compt. Rend. Acad. Sci. Paris. 1923. № 176. С. 507-510.
4. Aboulfadl H., Deges J., Choi P., Raabe D. Dynamic strain aging studied at the atomic scale // Acta Materialia. 2015. № 86. С. 34-42.
5. Yuzbekova D., Mogucheva A., Zhemchuzhnikova D., Lebedkina T., Lebyodkin M., Kaibyshev R. Effect of microstructure on continuous propagation of the Portevin-Le Chatelier deformation bands // Int. J. Plast. 2017. №96. С. 210-226.
6. Mogucheva A., Babich E., Ovsyannikov B., Kaibyshev R. Microstructural evolution in a 5024 aluminum alloy processed by ECAP with and without back pressure // Mater. Sci. Eng. A 2013. №560. С. 178-192.

DOI: 10.17223/9785946218412/74

ВЛИЯНИЕ ИПД НА ПРОЯВЛЕНИЕ ЭФФЕКТА ПЛШ В ALMGMNZR СПЛАВЕ

Борисова Ю.И., Юзбекова Д.Ю., Могучева А.А.

Белгородский государственный университет, Белгород

Al–Mg сплавы в течение длительного времени использовались в качестве основных материалов для исследования эффекта Портевена-Ле Шателье (ПЛШ) [1], которое характеризуется пространственно-временными закономерностями локализации пластической деформации [2]. В данной работе было изучено проявление эффекта ПЛШ в трех различных микроструктурных состояниях AlMgMnZr сплава, полученных методами интенсивной пластической деформации (ИПД).

Исследуемый сплав, полученный методом непрерывного литья и последующей гомогенизации при температуре 360°C в течение 6 часов, был подвергнут: 1) прокатке при комнатной температуре со степенью обжатия 70% и последующему рекристаллизационному отжигу при температуре 400°C в течение 2 часов – это состояние обозначили как КЗ; 2) равноканальному угловому прессованию при температуре 300°C до степени деформации $\varepsilon \sim 12\%$ - это состояние обозначили как УМЗ; и 3) холодной прокатке при комнатной температуре и степени деформации 80% - это состояние обозначили как СМК. Образцы исследуемого сплава были деформированы в интервале скоростей деформации $5,2 \times 10^{-5} - 2,1 \times 10^{-1} \text{ с}^{-1}$.

Анализ деформационных кривых AlMgMnZr сплава в КЗ состоянии, полученных при комнатной температуре и различных скоростях деформации показывает, что увеличение скорости деформации приводит к изменению формы скачков нагрузки в следующей последовательности А → В → А. Таким образом, зубчатость типа А наблюдается при низких (1×10^{-5} , $5,2 \times 10^{-5}$ и $1 \times 10^{-4} \text{ с}^{-1}$) и высоких (1×10^{-1} и $2,1 \times 10^{-1} \text{ с}^{-1}$) скоростях деформации, тогда как при промежуточной скорости ($1 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$) деформационная кривая исследуемого сплава характеризуется зубчатостью типа В.

Аналогичные испытания на растяжение в широком скоростном интервале были проведены для сплава в УМЗ состоянии. Измельчение зеренной структуры приводит к изменению последовательности типов прерывистого течения. Зубчатость типа В наблюдается при скорости деформации $1 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Увеличение или уменьшение скорости деформации сопровождается склонностью к типу А. Деформационные кривые при высоких скоростях деформации (1×10^{-1} и $2,1 \times 10^{-1} \text{ с}^{-1}$) характеризуются чистым типом А. В тех случаях, когда тип В проявляет стойкость, можно наблюдать смешанный тип А+В. На деформационных кривых тип В исчезает постепенно при уменьшении скорости деформации ($\leq 1 \times 10^{-4} \text{ с}^{-1}$). Такая склонность к типу В приводит к поведению при котором зубчатость типа В чередуется со смешанным типом А+В.

Также были проанализированы кривые зависимости напряжения от деформации AlMgMnZr сплава в СМК состоянии, полученные при комнатной температуре и различных скоростях деформации. На деформационных кривых, полученных при скорости деформации 1×10^{-2} и $1 \times 10^{-1} \text{ с}^{-1}$, наблюдаются регулярные глубокие колебания напряжения течения после начала шейкообразования. В общем случае, кривые деформации характеризуются отсутствием скачков нагрузки на стадии пластического течения. Однако, зубчатость типа С, которая характеризуется регулярными глубокими падениями напряжения течения ниже общего уровня кривой, можно наблюдать на стадии разупрочнения деформационной кривой полученной при скорости деформации $1 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Таким образом, можно сделать вывод, что ИПД AlMgMnZr сплава приводит к подавлению эффекта ПЛШ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (Соглашение № 17-72-20239) с использованием оборудования Центра коллективного пользования "Технологии и Материалы НИУ "БелГУ".

1. Aboulfadl H. et al. Dynamic strain aging studied at the atomic scale //Acta Materialia. 2015. Т. 86. С. 34-42.
2. Robinson J. M. Serrated flow in aluminium base alloys //International Materials Reviews. 1994. Т.39. №.6. С.217-227.

DOI: 10.17223/9785946218412/75

**ДОЛГОВЕЧНОСТЬ АЛЮМИНИЕВЫХ И ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ ПРИ
КОМБИНИРОВАННОМ УДАРНО-ВОЛНОВОМ И ПОСЛЕДУЮЩЕМ
ГИГАЦИКЛОВОМ НАГРУЖЕНИИ**

Оборин В.А., Соковиков М.А., Наймарк О.Б.

Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Россия

В работе проведено исследование кинетики роста усталостных трещин в сплавах алюминия АМг6, Д16Т и титана ВТ-6 в режиме сверхмногоциклового усталости на испытательной машине резонансного типа Shimadzu USF-2000 при предварительном динамическом деформировании на разрезном стержне Гопкинсона-Кольского при скоростях деформации до $\sim 10^3 \text{ с}^{-1}$. Актуальность постановки определяется важными приложениями – оценкой ресурса материалов и элементов конструкций авиационных газотурбинных двигателей в условиях полётного цикла при случайных динамических воздействиях.

Образцы, подвергнутые предварительному динамическому нагружению, подрезались и испытывались на усталость. Усталостное нагружение проводилось при уровнях напряжений 90-450 МПа. Ультразвуковая испытательная машина позволяет испытывать материалы на базе $10^9 - 10^{10}$ циклов с амплитудой от 1-го и до нескольких десятков микрометров частотой 20 кГц, что сокращает время испытания до нескольких дней в отличие от классических усталостных установок, на которых такое число циклов достигается за годы испытаний.

Обнаружено снижение на 15-25% предельного напряжения разрушения предварительно нагруженного сплава АМг6 с уровня напряжения 162 МПа в исходном (недеформированном) состоянии до уровня напряжений 121-138 МПа, соответствующего критическому количеству циклов $\sim 7,5 \cdot 10^8$. Снижение предельного напряжения разрушения предварительно нагруженного сплава Д16Т (с уровня напряжения 150 МПа в исходном, недеформированном, состоянии до уровня напряжений 90-105 МПа) достигало 30-40%. Обнаружено снижение предельного напряжения разрушения предварительно нагруженного сплава ВТ-6 с 450 МПа до уровня 130 МПа, соответствующего критическому количеству циклов $\sim 1,3 \cdot 10^8$

Поверхностный рельеф разрушенных образцов исследовался методами фрактального анализа с помощью интерферометра-профилометра высокого разрешения New-View (при увеличении $\times 2000$) для определения характеристик коррелированного поведения многомасштабных дефектных структур, с которыми связывалось распространение трещины.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Пермского края в рамках научных проектов № 18-08-01186, 19-48-590009, 17-41-590149, 17-08-00905, 17-01-00867.

DOI: 10.17223/9785946218412/76

**ОСОБЕННОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ МЕЗОСКОПИЧЕСКОГО СТРУКТУРНОГО
УРОВНЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ДЛИННОГО СТАЛЬНОГО СТЕРЖНЯ. МЕТОД
КОРРЕЛЯЦИИ ЦИФРОВЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ**

¹Пляскин А.С., ^{1,2}Клопотов А.А., ²Потекаев А.И.,
¹Кошко Б.О., ¹Волокитин О.Г., ¹Власов Ю.А.

¹Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, Россия
²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Для практики важной является задача по определению закритической деформации сжатых стержней. Кроме того, эта проблема имеет и фундаментальное значение, поскольку позволяет установить случаи неприменимости линейных уравнений и уточнить критерий устойчивости [1]. При деформации длинных стержней важным параметром является первая

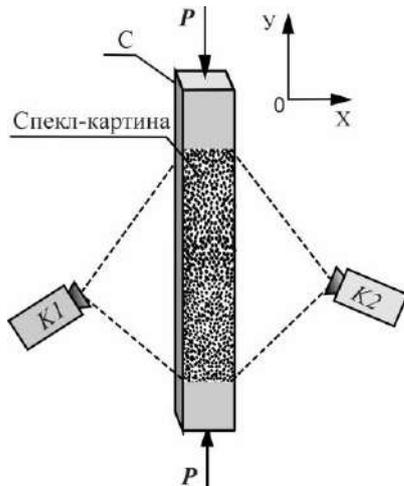


Рис. 1. Схема регистрации изображений со спекл-картины на стальном стержне. С – стальной стержень; K1 и K2 – цифровые камеры; P – прикладываемая нагрузка

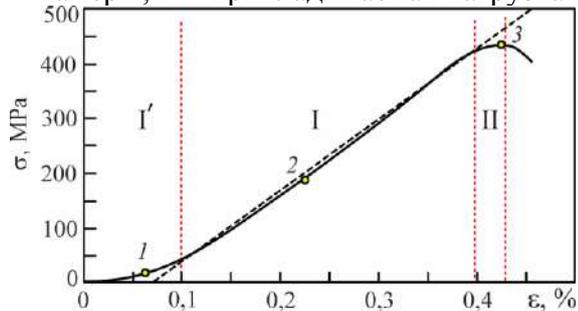


Рис. 2. Диаграммы деформирования при сжатии длинного стального стержня.

Цифры 1, 2, 3 возле точек на деформационной кривой соответствуют картинам распределений деформационных полей на рис. 3

Цель данной работы – исследовать *in situ* эволюцию на мезо- и макромасштабном уровнях эволюцию полей деформаций прямоугольных стальных стержней с соотношением сторон 16,7×1×1.

В качестве материала исследования использовали сталь 40X. Испытание образцов на сжатие проводили при помощи гидравлического пресса UTM-4500 (рис. 1). Определение эволюции распределения относительных и абсолютных деформаций использовалась стереоскопическая измерительная система VIC-3D[2]. Для этого на поверхности испытуемых образцов создавалась спекл-поверхность в виде хаотически распределенных черных точек на

критическая сила и предполагается, что для сжатого стержня она является предельной. При малых значениях силы P ось стержня остается прямой и в стержне возникают напряжения сжатия σ . При увеличении силы P происходит достижение критического значения и вместо прямолинейной формы равновесия должна иметь место другая, искривленная форма. Под критической силой понимают силу, при которой прямолинейная форма равновесия стержня перестает быть устойчивой. В предположении, что продольный изгиб происходит в плоскости наименьшей жесткости стержня расчет критической силы $P_{кр}$ можно проводить по формуле Эйлера [1]:

$$P_{кр} = \frac{\pi^2 EI_{\min}}{l^2},$$

где E – модуль Юнга материала, l – длина стержня I_{\min} – минимальный момент инерции сечения.

Применение современных методов, использующих визуализацию эволюции деформационных полей в процессе нагружения позволяет на макро- и мезоуровнях получить информацию об особенностях протекания деформационных процессов в длинных стальных стержнях.

Микро- и мезоструктурная неоднородности, которые образуются при деформации твердых тел приводят к нарушению их идеальной кристаллической структуры и как следствие находят отражение в распределении деформационных полей на поверхности.

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

белой поверхности. Регистрация эволюций изображений спекл-поверхностей с помощью двух камер и использования программы VicSnap позволило определять поля смещений локальных участков поверхности вдоль оси OX – «поперечная деформация», вдоль оси OY – «продольная деформация» (рис. 1) [2].

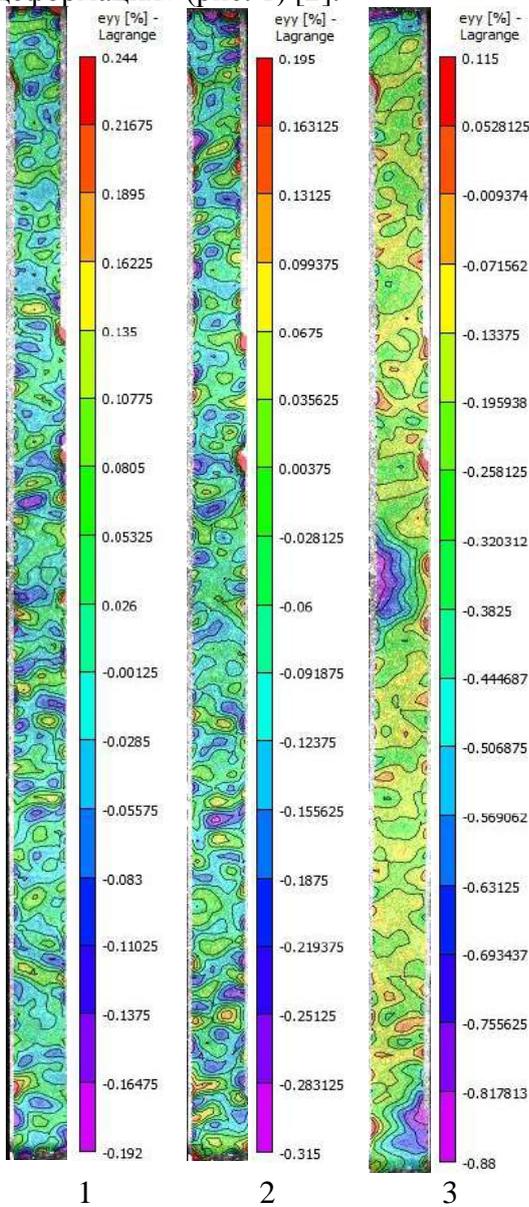


Рис. 3. Картины распределений вертикальных относительных деформаций на поверхности стального стержня. Цифры 1, 2, 3 показывают на диаграмме на рис. 2 соответствующие деформационно-напряженные состояния образца

значения 0,88%. Преобладание очагов пластической деформации с отрицательными значениями деформации на этой стадии отражает то, что прямолинейная форма равновесия стержня перестает быть устойчивой и произошло искривление стержня.

На рис. 2 приведена диаграмма деформирования $\sigma=f(\epsilon)$ при сжатии длинного стального стержня. На функциональной зависимости $\sigma=f(\epsilon)$ можно выделить три стадии. Стадия I' отражает на начальном этапе эксперимента процесс аккомодации пластин испытательной машины с торцами образца. Следующая стадия (стадия I) соответствует непосредственно деформации длинного стального стержня. Появление стадии II обусловлено потерей устойчивости длинного стержня при сжатии.

Применение системы VIC-3D позволило получить картины, детально отражающие эволюцию распределения изополей относительных деформаций на поверхности стальных стержней и разный характер распределений деформационных полей на разных стадиях (рис. 3).

На стадии I' на концах образца на картине распределений деформационных полей (рис. 3, картина 1) видны очаги локальной деформации с высокими положительными значениями деформации ($\epsilon \approx 0,24\%$), которые значительно выше средней деформации по образцу (рис. 1, точка 1). Причем области сжатия и расширения чередуются и хаотически распределены по образцу.

На стадии I на картине распределений деформационных полей (рис. 3, картина 2) продолжается хаотическое чередование очагов пластической деформации сжатия и расширения, которое имело место на стадии I'. Однако плотность локальных очагов сжатия и расширения пластической деформаций в области торцов стержня выше, чем по образцу.

При переходе в область стадии II на картинах распределений деформационных полей (рис. 3, картина 3) наблюдается образование более крупных очагов пластической деформации. Причем в основном эти области имеют отрицательное значение. Кроме того, в центральной части образца образовалась значительная по размерам область с отрицательными высокими значениями. В эпицентре этого очага деформация достигает

1. Вольмир А.С. Устойчивость деформируемых систем. – М: Наука. 1967. 984 с.

2. Федоров В.С., Копаница Д.Г., Клопотов А.А. и др. Экспериментальные исследования упруго-пластической деформации клеевых соединений методом корреляции цифровых изображений. Вестник ТГАСУ. №2, 2017. 79-97.

DOI: 10.17223/9785946218412/77

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВРЕЖДАЕМОСТИ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ В ШИРОКОМ
ДИАПАЗОНЕ СКОРОСТЕЙ ДЕФОРМАЦИИ**

Скрипняк В.В., Скрипняк Н.В., Козулин А.А., Скрипняк Е.Г., Скрипняк В.А.
Томский государственный университет, Томск

Цель данной работы состояла в разработке определяющего уравнения для описания механического поведения крупнозернистых (КК) и ультрамелкозернистых (УМЗ) титановых сплавов в диапазоне скоростей деформации от 0.001 до 1000 с⁻¹. Определяющее уравнение для описания упругопластического поведения и модель вязкого разрушения были проверены путем моделирования испытаний на растяжение образцов с постоянным сечением и образцов с надрезами КК и УМЗ титановых сплавов.

Результаты компьютерного моделирования сопоставлены с результатами экспериментальных исследований механического поведения альфа титановых сплавов VT1-0, VT5-1 (аналога сплава Ti-5Al-22,5Sn), альфа – бета титанового сплава VT-6 (аналога сплава Ti-6Al-4V), и в широком диапазоне скоростей деформации (от 0,001 до 1000 1/с) и параметра трехосности напряженного состояния $\eta = -p/\sigma_{eq}$ от 0,025 до 0,6 в температурном диапазоне от 291 К до 1000 К, а также деформации бета титанового сплава Ti-45%Nb в крупнокристаллическом и ультрамелкозернистом состоянии. Образцы пяти разных форм были использованы в экспериментах по изучению деформирования и разрушения сплавов VT1-0, VT5, VT6 в условиях одноосного растяжения, сдвига. Экспериментальные исследования были выполнены на сервогидравлическом испытательном стенде Instron VHS 40/50-20. Полученные экспериментальные результаты свидетельствуют о влиянии скорости деформации и параметра трехосности напряженного состояния η на закономерности динамического повреждения и разрушения альфа и альфа-бета титановых сплавов.

Поля перемещений и деформаций в рабочей части образцов определялись методом корреляции цифровых изображений (DIC). Получено, что локализация пластической деформации играет основную роль в процессе разрушения крупнозернистых и ультрамелкозернистых титановых сплавов при низких значениях коэффициента трехосной напряженности.

Предложена модификация модели повреждения для описания кинетики разрушения титановых сплавов в широком диапазоне скоростей деформации и напряженных состояний.

Для описания пластического течения, повреждений и разрушения использована модификация модели пластичности Гурсона-Твергаарда-Нидельмана (GTN) и кинетической модели разрушения для зарождения, роста и слияния повреждений [1,2].

Результаты моделирования растяжения плоских образцов титановых сплавов показали, что в зоне шейки либо в области локализации пластической деформации параметр трехосности напряженного состояния изменяется. Установлено, что увеличение параметра трехосности напряженного состояния от 0.33 до 0.5 при скоростях деформации от 10 до ~ 850 с⁻¹ и приводят к уменьшению деформации до разрушения крупнокристаллических альфа и альфа-бета титановых сплавов в 2 – 2.5 раза. Степень снижения величины деформации до разрушения у ультрамелкозернистых альфа и альфа-бета титановых сплавов при растяжении в диапазоне скоростей деформации от 1 до 1000 1/с выше, чем у крупнокристаллических аналогов.

1. Bai Y. and Wierzbicki T. A new model of metal plasticity and fracture with pressure and Lode dependence // International Journal of Plasticity. 2008. V.24. P. 1071–1096.
2. Tvergaard V. Study of localization in a void-sheet under stress states near pure shear // International Journal of Solids and Structures. 2015. V. 60–61. P. 28–34.
3. Skripnyak V.V., Kozulin A. A., Skripnyak E. G., Skripnyak V. A. Fracture of alpha titanium alloys at high strain rates and stress triaxiality // Proc. of the Inter. Conf. on Computational Methods 9th ICCM, 6th-10th August 2018, Rome, Italy. 2018. V.5. P.546-557.

DOI: 10.17223/9785946218412/78

**ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ПОДХОД ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ
ДИНАМИЧЕСКОГО РАЗРУШЕНИЯ**

¹Пашков С.В., ^{1,2}Зелепугин С.А., ^{1,2}Янов Д.В.

¹*НИИ Прикладной математики и механики Томского государственного университета*

²*Томский научный центр СО РАН, Томск*

Во многих задачах разрушения фрагментация является существенно вероятностным процессом, который определяется стохастическим характером распределения неоднородностей внутренней структуры материала. Описан вероятностный подход, позволяющий в достаточно простой форме, практически без усложнения модели и дополнительных экспериментов, моделировать структурные неоднородности материала. С использованием экспериментальных данных и результатов численного моделирования показано, что введение в модель материала всего одного дополнительного параметра (дисперсии распределения прочностных свойств) позволяет на любом масштабном уровне моделирования структуры придать процессу трещинообразования вероятностный характер, что соответствует теоретическим представлениям и экспериментальным данным. Начальные неоднородности и дефекты структуры материала моделируются тем, что прочностные характеристики материала распределяются по выбранному закону распределения по ячейкам расчетной области. Показано, что осколочные спектры, полученные с использованием разных законов распределения с одинаковой дисперсией, совпадают с точностью до вероятностного фактора [1], что позволяет использовать в расчетах любой закон распределения.

Для придания процессу вероятностного характера, приближенного к реальности, распределение прочностных характеристик по объёму образца (узлам и ячейкам расчетной области) должно обеспечивать некий разброс предельных состояний материала, при которых начинается образование микротрещин. При этом информация о реальной внутренней структуре становится избыточной и даже для композитов при численном моделировании становится возможным использовать эффективные значения физико-механических и прочностных характеристик.

Численные эксперименты с разрушением толстостенных цилиндрических оболочек [1] показали, что на формирование осколочного спектра дисперсия начального распределения прочностных свойств оказывает более сильное влияние, чем его форма. Это снижает требования, предъявляемые к выбору закона распределения и позволяет в аналитических и численных расчетах с одинаковым успехом использовать практически любой унимодальный закон распределения, в частности, нормальный как наиболее удобный. Определяющее влияние дисперсии распределения вполне согласуется с теоретическими представлениями – реализоваться в макротрещины смогут не все дефекты структуры, а лишь те, чьё отклонение от среднего значения превышает определенную величину. Другими словами, формирование осколочного спектра для конкретной задачи определяется ограниченным участком функции распределения предельных значений. Ширина этого участка зависит от скорости деформации и определяется исходя из условия распространения волн разгрузки (от первых микротрещин) на весь объём разрушаемого образца. В дальнейшем происходит локализация деформаций, рост и слияние трещин и вид функции распределения на оставшемся диапазоне уже практически не влияет на крупную фракцию осколочного спектра.

Авторы предлагают использовать нормальное распределение, как более обоснованное теоретически и удобное для моделирования, в отличие от распространённого подхода [2], в котором используется распределение Вейбулла, вытекающее из степенной «функции катастроф» в теории Мотта. При отсутствии привязки к эксперименту используется, как правило, дисперсия, соответствующая 10-процентному практическому интервалу (99% значений случайной величины попадают в интервал $\pm 10\%$ от номинального значения [1]). Уменьшение дисперсии, как правило, увеличивает мелкую фракцию осколочного спектра, увеличение – увеличивает крупную фракцию. Использование нормального закона для

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

распределения позволяет достаточно легко математически выделить интересующий интервал и исключить нефизические значения случайных величин.

Разрушение стального кольца (рис. 1), надетого на заполненную взрывчатым веществом металлическую трубу [2, 3] также является хорошей иллюстрацией вероятностного подхода, так как схема эксперимента обеспечивает достаточно равномерную радиальную скорость. В связи с тем, что скорость деформации практически одинакова для всех точек кольца, разделение его на фрагменты происходит благодаря наличию внутренних неоднородностей и локализации деформаций на самых крупных из них. Итоговый осколочный спектр, полученный в работе [4] с использованием описываемого подхода, качественно и количественно согласуется с результатами экспериментов [3] как по количеству формируемых фрагментов, так и по их массам. Стоит отметить, что в [3] авторы также приходят к выводу, что выбор закона распределения не оказывает на осколочный спектр существенного влияния.

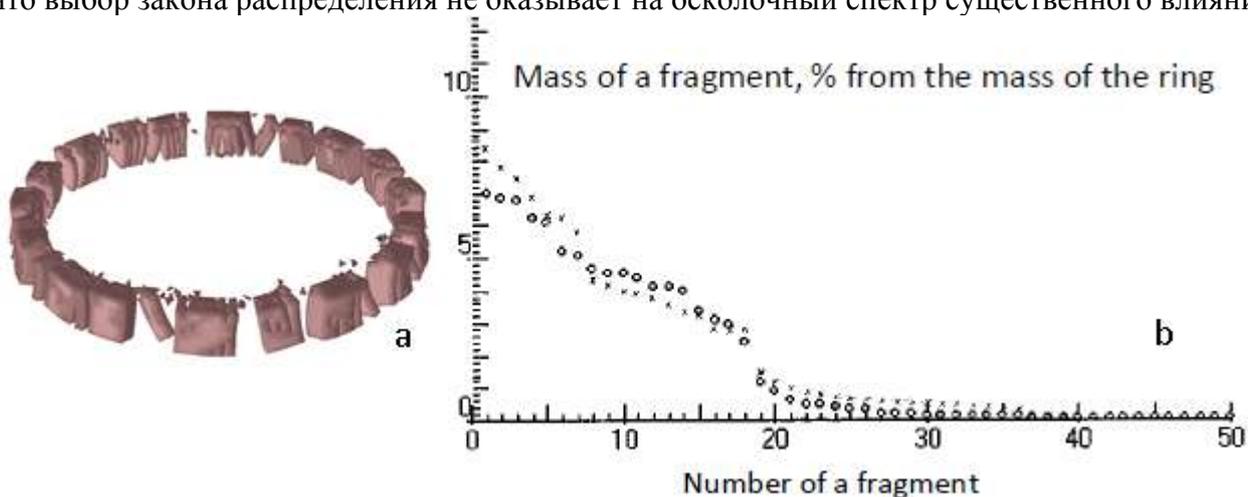


Рис. 1 – Взрывное разрушение кольца: а) расчёт [4];
б) сравнение результатов расчёта [4] с экспериментом [3].

Предложенный вероятностный подход может использоваться при любом шаге сетки и на любом уровне многоуровневого моделирования, обеспечивая распределение неоднородностей характерного размера. Это позволяет повысить точность расчетов и снять ограничения классического подхода к численному моделированию задач разрушения, решая их в наиболее приближенной к реальности постановке. В рамках данного подхода лишь вносится стохастический фактор, поэтому не требуется специальных экспериментов для предварительного исследования структуры материала. Подход может применяться при использовании любых моделей материала и критериев разрушения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №16-19-10264).

1. Пашков С.В. Влияние распределения дефектов структуры на осколочный спектр при моделировании взрывного разрушения толстостенных цилиндрических оболочек // Труды ТГУ. Серия физико-математическая. 2018, Том 302, С. 204-211.
2. Lambert D.E., Weiderhold J., Osborn J., Hopson M.V. Explosively driven fragmentation experiments for continuum damage modelling // Journal of Pressure Vessel Technology, Transactions of the ASME, 2012, Vol. 134, Issue 3, 031209.
3. Diep Q.B., Moxnes J.F., Nevstad G. Fragmentation of projectiles and steel rings using 3D numerical simulations // Proc. 21th Int. Symp. on Ballistics, 19–23 April 2004, Adelaide, Australia, 2004. P. 752.
4. Герасимов А.В., Пашков С.В. Численное моделирование пробития слоистых преград // Механика композиционных материалов и конструкций, 2013, Том 19, №1, С. 49-62.

DOI: 10.17223/9785946218412/79

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ СЛОЕВ БИМЕТАЛЛА

¹Ли Ю.В., ^{1,2}Баранникова С.А., ^{1,3}Шляхова Г.В., ^{1,2}Зуев Л.Б.

¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

³*Северский технологический институт НИЯУ МИФИ, Северск*

Важнейшими показателями качества двухслойного проката, определяющими его технологичность при изготовлении оборудования и эксплуатационные свойства изделия, являются сплошность и прочность соединения слоев, структура и свойства плакирующего слоя и переходной зоны [1-3]. Целью данной работы являлось исследование структуры слоев биметалла и влияния неоднородности деформации материала [4] на зарождение и развитие микротрещин биметалла.

Материалом исследования являлся коррозионностойкий биметалл Ст.3+12X18H10T. Предварительно подготовленные образцы в форме двойной лопатки с размерами рабочей части 50×8×2 мм растягивались на испытательной машине LFM-125 до разрушения. Металлографическое исследование биметалла проводили на микроскопе (Neophot-21). Дополнительная информация о структурной неоднородности деформируемых слоев биметалла была получена по данным атомно-силовой микроскопии.

Диффузионные процессы, развивающиеся вблизи поверхности раздела слоев при производстве биметаллов Ст.3+ 12X18H10T горячей прокаткой, определяют особенности строения переходной зоны биметалла. При охлаждении с прокатного нагрева в слое стали 12X18H10T формируется пересыщенный аустенит, степень пересыщения которого зависит от условий охлаждения и распределения углерода, а повторный нагрев до 500-700 °С вызывает выделение карбидов по границам зерен. Диффузионное перераспределение углерода между плакирующим слоем 12X18H10T и основным слоем Ст.3 при горячей прокатке привело к значительному различию значений твердости микрообъемов переходной зоны биметалла. При исследовании слоев биметалла методом ACM (*Solver PH47-PRO*) в обезуглероженной зоне основного слоя были зафиксированы микротрещины, образование которых может быть обусловлено выделением карбидов по границам ферритных зерен, связанных с диффузией хрома.

Установлено, что химическая и структурная неоднородность переходной зоны биметалла изменяет уровень неоднородности деформации микрообъемов переходной зоны по сравнению с основными слоями, что оказывает влияние на характер зарождения и развития микротрещин.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук России на 2013-2020 гг., направление III.23.1.2. и частично поддержана грантом РФФИ № 17-08-00751-а.

1. Потапов И.Н. Слоистые металлические композиции. - М.: Металлургия, 1986. – С. 90-150.
2. Голованенко С.А., Меандров Л.В. Производство биметаллов. - М.: Металлургия, 1966. – С. 297.
3. Трыков Ю.П., Даненко В.Ф., Гуревич Л.М., Сергиенко А.С. Прогнозирование прочностных характеристик биметаллической коррозионностойкой проволоки // Производство проката. - 2009. - № 9. - С. 29-33.
4. Баранникова С.А., Зуев Л.Б., Данилов В.И. Кинетика периодических процессов при пластическом течении // ФТТ. 1999. Т. 41. № 7. С. 1222-1224.

**Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения
в материалах с иерархической структурой**

DOI: 10.17223/9785946218412/80

**ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО РЕЛЬЕФА В КЕРАМИКЕ $ZrO_2(Y_2O_3)$
МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ**

^{1,3}Шляхова Г.В., ¹Саблина Т.Ю., ¹Севостьянова И.Н., ^{1,2}Зуев Л.Б., ^{1,2}Кульков С.Н.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск

²Томский государственный университет, Томск

³Северский технологический институт НИЯУ МИФИ, Северск

Керамика на основе ZrO_2 в отличие от других керамик обладает уникальным механизмом увеличения вязкости, за счет трансформационного фазового перехода, когда тетрагональная фаза в полях внутренних напряжений превращается в моноклинную, обуславливая сочетание высоких значений прочности и вязкости разрушения материала. Мартенситную природу трансформационного $t \rightarrow m$ превращения исследовали различными методами, среди которых рентгеновская дифракция, растровая и просвечивающая электронная микроскопия, порошковая нейтронная дифракция и совсем недавно атомно-силовая микроскопия.

Целью данной работы является исследование методами атомно-силовой микроскопии деформационного рельефа, формирующегося в зоне индентирования, в керамике с разным размером зерна.

Изучена керамика $ZrO_2-5.5\text{вес.}\%Y_2O_3$ с размером зерна 0.5, 0.9 и 1.55 мкм. Индентирование образцов осуществляли при нагрузке 150 Н на твердомере «Супер-Виккерс». Исследование поверхности керамики в области отпечатка проводили на атомно-силовом микроскопе Solver PRO-47Н.

Установлено, что вокруг отпечатка и в зоне распространения трещины из его угла наблюдается деформационный рельеф, параметры которого представлены в таблице. Видно, что с ростом размера зерна высота практически не изменяется, а его ширина заметно увеличивается, при этом он отличается по фазовому контрасту и его «объем» увеличивается с ростом размера зерна.

Размер зерна, мкм	Высота деформационного рельефа, мкм	Ширина деформационного рельефа, мкм	Доля рельефа с измененным фазовым контрастом, %	Содержание моноклинной фазы на поверхности разрушения, %
0.5	0.1 ± 0.07	0.8 ± 0.1	11	5
0.9	0.13 ± 0.05	1.25 ± 0.2	21	21.3
1.55	0.14 ± 0.06	2.1 ± 0.2	27	27

В таблице также приведены данные о фазовом составе керамики, полученные при исследовании поверхностей разрушения методом рентгенофазового анализа. Видно, что при трансформационном тетрагонально-моноклинном превращении содержание моноклинной фазы увеличивается с ростом размера зерна керамики. Этот хорошо известный факт в литературе и хорошая корреляция с «объемом» рельефа вблизи угла отпечатка, отличающегося по фазовому контрасту, свидетельствует о том, что этот рельеф образован мартенситной фазой.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук России на 2013-2020 гг., направление III.23 и частично поддержана грантом РФФИ № 17-08-00751-а.

DOI: 10.17223/9785946218412/81

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕОДНОРОДНОСТИ ДЕФОРМАЦИИ КЕРАМИКИ
 $ZrO_2 (Y_2O_3)$ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ

¹Саблина Т.Ю., ¹Севостьянова И.Н., ¹Горбатенко В.В., ¹Рыжова Л.Н.,
¹Молчунова Л.М., ^{1,2}Кульков С.Н.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск
²Томский государственный университет, Томск

Исследование макроскопического деформационного поведения керамических материалов, не проявляющих в обычных условиях пластической деформации, является актуальной задачей современного материаловедения для понимания происходящих в них процессов и прогноза их поведения в условиях механического воздействия. Методом корреляции цифровых изображений возможно проанализировать эволюцию картин макроскопической локализации упругой деформации в процессе активного нагружения.

Целью данной работы было исследование деформационного поведения керамики на основе диоксида циркония при испытаниях образцов на диаметрально сжатие методом цифровой корреляции изображений, полученных в процессе нагружения.

Исследовали керамические образцы $ZrO_2 - 5.5 \text{ вес.} \% Y_2O_3$ при их нагружении диаметрально сжатием (бразильский тест). Образцы имели размеры $\varnothing = 28 \text{ мм}$, $h=12 \text{ мм}$, пористость 4% и размер зерна 1.1 $\mu\text{м}$. Фазовый состав керамики представлен тетрагональной и кубической фазами диоксида циркония в соотношении 80:20. Диаметрально сжатие керамических образцов осуществляли на испытательной машине Instron-1185 при скорости перемещения подвижной платформы 0.1 mm/min с автоматической записью диаграммы нагружения «нагрузка – перемещение». Измерение полей смещений проводили методом корреляции цифровых изображений разработанным ранее, из которых определяли компоненты тензора дисторсии по полученным векторам смещений.

Получены пространственно-временные картины локализации деформации вдоль и поперек оси нагружения деформируемого образца, ε_{xx} и ε_{yy} . С увеличением нагрузки общая деформация вдоль оси диаметрально сжатия, ε_{yy} составила около 0.3%, а вдоль оси ε_{xx} она меньше и равна 0.12%. Установлено, что накопление деформаций ε_{xx} и ε_{yy} неоднородно по образцу. При этом происходит изменение микроструктурных параметров, таких как размер областей когерентного рассеяния тетрагональной фазы и микронапряжений и реализуется тетрагонально-моноклинное превращение. Эта локализация коррелирует с зафиксированной неоднородностью возникающих в объеме материала микронапряжений.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук России на 2013-2020 гг., направление III.23

DOI: 10.17223/9785946218412/82

ВЛИЯНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ НА ИЗНОСОСТОЙКОСТЬ БЕРИЛЛИЕВОЙ БРОНЗЫ

¹Сизова О.В., ¹Колубаев А.В., ¹Филиппов А.В., ¹Терюкалова Н.В., ^{1,2}Денисова Ю.А.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

Бериллиевые бронзы в связи с высокими показателями прочностных и антифрикционных свойств, а так же коррозионной стойкостью, все чаще применяют для изготовления деталей узлов трения ответственного назначения в различных областях машиностроения: для производства опор скольжения тяжело нагруженных агрегатов и устройств, в авиакосмической отрасли. Оптимальными эксплуатационными свойствами при этом обладают сплавы, содержащие около 2-2,5 % Ве, при этом в зависимости от вида термообработки может быть получен как гомогенный твердый раствор бериллия в меди, так и двухфазная структура твердого раствора с выделившимися дисперсными частицами фазы CuBe. Влияние режимов термообработки бериллиевых бронз на структуру и прочностные свойства бериллиевых бронз исследованы достаточно подробно, однако, структурные аспекты износостойкости бериллиевых бронз, к сожалению, обсуждаются недостаточно [1].

В данной работе исследовали трибологические характеристики бериллиевой бронзы БрБ2 в зависимости от ее структурного состояния. Исследования проводились в условиях сухого трения скольжения по схеме диск-палец. Цилиндрические образцы высотой 8,0 мм и диаметром 5,0 мм подвергали закалке от 800⁰С с последующим старением при 315⁰С в течение 4 часов. Металлографические исследования проводили на лазерно-конфокальном микроскопе «LEXT OLS4000», частицы износа анализировали с помощью растрового электронного микроскопа Philips SEM 515 с энергодисперсионным рентгеновским микроанализатором «Genesis». Триботехнические испытания образцов в закаленном и состаренном состоянии проводили на триботестере фирмы «TRIBOtechnic» при нагрузке 20Н и скорости скольжения 100 мм/с. Время испытания составило 4 часа, контртелом служил высокохромистый сплав 95Х18.

На рисунке 1 приведена зависимость коэффициента трения от времени испытания исследованных образцов.

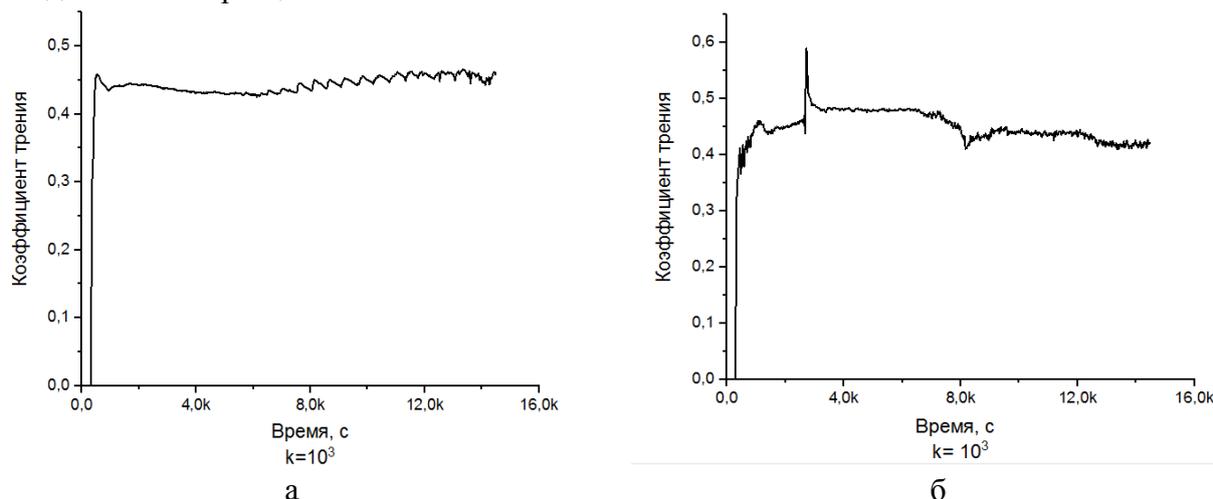


Рис 1. Изменение коэффициента трения образцов бериллиевой бронзы (а – закаленной) и (б – закаленной и состаренной) в зависимости от времени испытания

Анализ временных зависимостей коэффициентов трения и результаты металлографических исследований показали, что в случае закаленных образцов изнашивание реализовалось по механо-химическому механизму, т.е. имело место окисление поверхности трения с последующим отделением частиц износа в виде ультрадисперсных частиц. Это подтвердил микрорентгеноспектральный анализ, который показал высокое содержание

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

кислорода в частицах износа. При испытании на трение состаренных образцов было установлено, что механизм изнашивания носит характер адгезионного. При этом абсолютная величина коэффициента трения у обоих видов образцов была практически одинакова.

На рисунке 2 показаны частицы износа закаленной бериллиевой бронзы и состаренной. Видно, что изнашивание закаленного образца характеризуется образованием ультрадисперсных частиц износа, которые образуют конгломераты при отделении с поверхности трения (рисунок 2,а,в). Изнашивание состаренного образца происходит путем отделения крупных частиц износа в результате адгезионного взаимодействия с контртелом (рисунок 2,б). Анализ тонкой структуры частиц износа в этом случае указывает на последовательные сдвиги в тонких слоях образца перед отделением частицы (рисунок 2,г). По-видимому, присутствие в структуре состаренной бронзы твердых частиц снижает сопротивление деформационному упрочнению в процессе изнашивания.

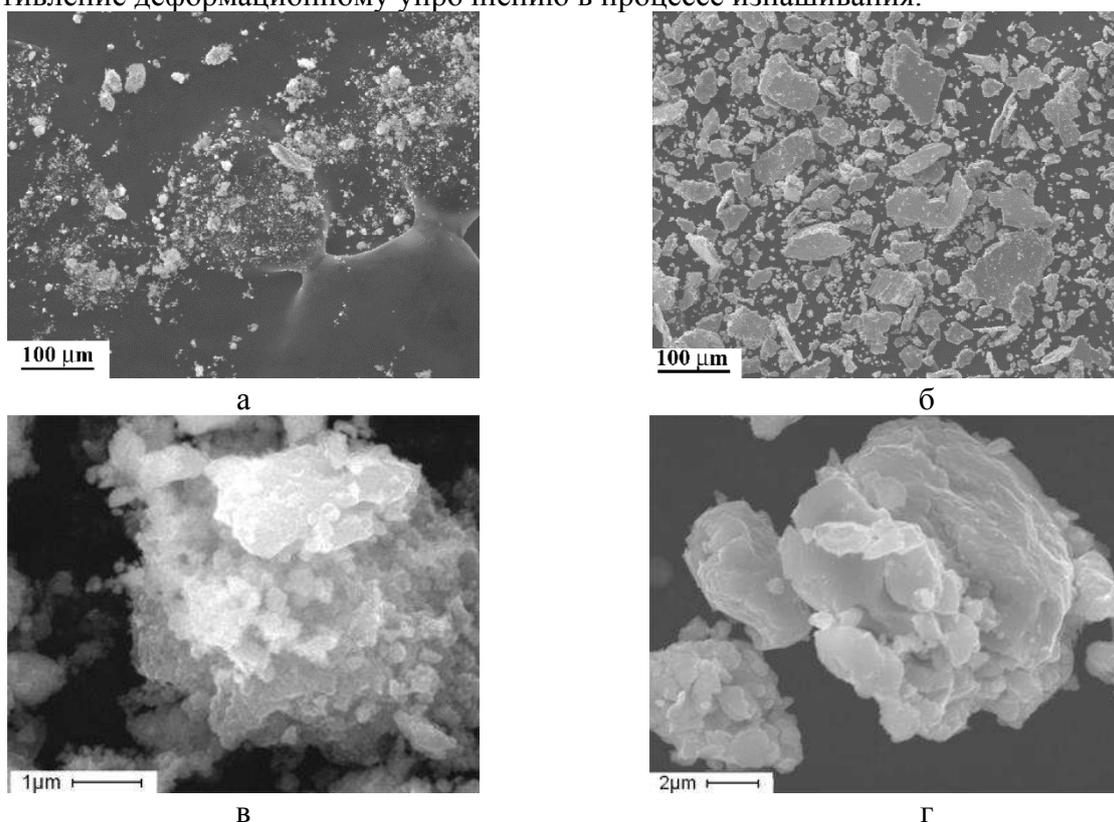


Рис. 2. Микрофотографии структуры частиц износа бериллиевой бронзы БрБ2 после испытаний на трение: а,в – закаленный образец; б,г – закаленный и состаренный образец

Сравнение интенсивности изнашивания по потере массы образцов за один и тот же период времени испытаний показало, что, несмотря на более высокий уровень твердости, закаленные и состаренные образцы изнашивались быстрее закаленных (таблица 1)

Таблица 1. Результаты сравнительного исследования износа образцов бронзы БрБ2

Закалка			Закалка + старение		
Масса образца, г					
Исходная	После трения	Δm	Исходная	После трения	Δm
1,5330	1,5317	0,0013	1,4996	1,4412	0,0584

Для понимания причин наблюдаемых эффектов необходимо проведение дальнейших исследований, в частности, с использованием просвечивающей электронной микроскопии.

1. Л.Г. Коршунов, А.В. Корзников, Н.Л. Черненко. Влияние интенсивности пластической деформации и температуры старения на упрочнение, структуру и износостойкость бериллиевой бронзы. // Физика металлов и металловедение, 2011, Т.111, №4, С.413-420.

DOI: 10.17223/9785946218412/83

**ЭВОЛЮЦИЯ ДЕФОРМАЦИОННЫХ СТРУКТУР НА ЭТАПЕ ФОРМИРОВАНИЯ
УСТАЛОСТНОЙ ТРЕЩИНЫ В СОЕДИНЕНИЯХ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ,
ВЫПОЛНЕННЫХ РОЛИКОВОЙ СВАРКОЙ**

Кибиткин В.В., Солодушкин А.И., Плешанов В.С., Гнусов С.Ф., Хатьков Д.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия

vvk@ispms.tsc.ru

Цель работы состояла в экспериментальном исследовании эволюции деформационных структур в сварных соединениях нержавеющей стали ферритного класса 08X17T при циклическом нагружении методом корреляции цифровых изображений. Деформационную структуру рассчитывали как пространственное распределение главного пластического сдвига на основе полей смещений. Поля смещений рассчитывали с малым пространственным периодом и с высокой точностью (абсолютная погрешность находилась на уровне 0,1 пикселя и менее).

Образцы сварного соединения с поперечным швом, выполненным роликовой сваркой, изготавливали в форме лопатки с размерами рабочей части 16×4,2×0,35 мм. Нагружение производили по схеме циклического растяжения при напряжении $\sigma=82\pm 82$ МПа, что соответствует многоциклового усталости.

Обнаружено, что усталость сварных соединений стали 08X17T включает следующие основные стадии: деформационное упрочнение, развитие двух конкурирующих шеек в области основного металла, работа одной (доминирующей) шейки, зарождение и распространение усталостной трещины.

На первой стадии ($0 \leq \lambda \leq 0,1$) пластическим течением охвачен весь образец (здесь λ – циклическое отношение). Деформационная структура в области основного металла (ОМ) и зоны термического влияния (ЗТВ) слева от шва имеет вид множества тонких линий (полосовая структура), ориентация которых к оси нагружения изменяется в пределах от 65° до 25° , а в правой части аналогичная структура имеет ориентацию линий от 0 до 20° . В области сварного шва регистрируются отдельные линии ручейковой текучести на фоне средней деформации, значения которой приблизительно на порядок меньше. Затем пластическое течение в ЗТВ и шве существенно ослабевает и в дальнейшем развивается преимущественно в основном металле. В конце данной стадии слева от шва наблюдается полосовая деформационная структура с сопряжённым направлением ориентации полос. Справа регистрируются две V-образные системы линий, отражающие развитие шейки.

На второй стадии ($0,1 < \lambda \leq 0,7$) в образце работают две конкурирующие шейки. Типичная для шейки деформационная структура также может иметь вид неполной шейки, представляющей собой полосовую структуру. На данной стадии в процессе нагружения поочередно то в одной области (слева от шва), то в другой (справа) регистрируются элементы шейки. Там, где скорость деформации мала, наблюдаются отдельные линии скольжения или линии ручейковой текучести. В некоторых областях пересечения тонких линий, связанных со сдвигами в разные моменты времени, образуют деформационную структуру типа параллелограммов или структуру типа сплюснутых шестигранников.

На третьей стадии ($0,7 < \lambda \leq 0,95$) наибольшая скорость пластического течения наблюдается в области доминирующей шейки. С ростом числа циклов нагружения в этой области возрастает размер шейки и увеличивается средняя деформация. Течение сохраняет прерывистый во времени характер.

В работе получена зависимость средней скорости деформации от циклического отношения и приведены основные типы деформационных структур.

Таким образом, деформационное поведение сварных соединений стали 08X17T на этапе формирования усталостной трещины определяется преимущественно развитием шеек в области основного металла, где впоследствии развитие трещины в пределах доминирующей шейки приводит к разрушению образца.

DOI: 10.17223/9785946218412/84

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕХАНИЗМА КУКА-ГОРДОНА В Y-TZP КЕРАМИКЕ

^{1,2,3}Буякова С.П., ^{1,2,3}Буяков А.С., ^{1,2,3}Кульков С.Н.

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

³Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Многие виды керамических материалов на основе оксидов, карбидов и боридов металлов существенно превосходят конструкционные стали и сплавы по прочности, однако низкая вязкость разрушения существенно ограничивает использование керамики в качестве конструкционных материалов. Создание структурно-фазовых условий сопротивления распространению трещин позволило бы существенно расширить области их применения, но несмотря на значительные успехи, достигнутые в направлении организации в хрупких материалах диссипативных структур, задача по увеличению надёжности и живучести керамики и керамических композитов далека от решения.

На протяжении многих лет особое внимание привлекает керамика на основе тетрагонального диоксида циркония, отличительной особенностью которого является относительно высокая трещиностойкость, достигаемая посредством трансформационного упрочнения, за счет мартенситного превращения зёрен тетрагональной модификации в моноклинную под действием механических напряжений, в том числе индуцируемых во фронте распространяющейся трещиной.

Иным подходом к приращению вязкости разрушения керамических материалов является создание гетеромодульной структуры и обеспечение условий реализации так называемого механизма Кука-Гордона. Основным критерием высокой трещиностойкости гетеромодульных материалов, согласно теории Кука-Гордона, является наличие изолированных дисперсных включений, величина модуля упругости которых должна быть не менее чем в 5 раз ниже модуля упругости матрицы. Слабая связь на межфазных границах матрицы и включений на пути распространяющейся интеркристаллитной трещины приводит к образованию разрыва на границе раздела фаз, обеспечивая диссипацию энергии в вершине трещины за счет резкого увеличения радиуса кривизны её фронта.

Целью настоящей работы являлась оценка влияния низкомодульных включений гексагонального нитрида бора (h -BN) на величину трещиностойкости K_{IC} керамики на основе стабилизированного иттрием тетрагонального диоксида циркония (Y-TZP).

Исследуемые в работе керамики Y-TZP и (Y-TZP)-(h -BN) получены методом горячего прессования порошковых смесей при давлении 40 МПа и температуре 1600 °С. Концентрация h -BN в образцах составляла 0.25; 0.5; 1; 3 и 5 масс. %.

Фазовый состав определен с помощью рентгенофазового анализа. Модуль упругости E керамики определен из скорости прохождения ультразвука через образцы с помощью ультразвукового дефектоскопа. Величина K_{IC} оценена по суммарной длине радиальных трещин из углов отпечатка индентора Виккерса на полированной поверхности образцов керамики.

Согласно результатам рентгенофазового анализа во всех исследуемых образцах диоксид циркония находился в тетрагональной модификации. Трещиностойкость керамики Y-TZP составила $7,2 \pm 0,21$ МПа·м^{1/2}. Введение в керамическую матрицу h -BN в количестве 0.25 и 0.5 масс. % привело к заметному увеличению K_{IC} . Наибольшую трещиностойкость $K_{IC} = 12 \pm 0.53$ МПа·м^{1/2} продемонстрировала керамика, содержащая 0.5 масс. % частиц h -BN, рис. 1.

**Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения
в материалах с иерархической структурой**

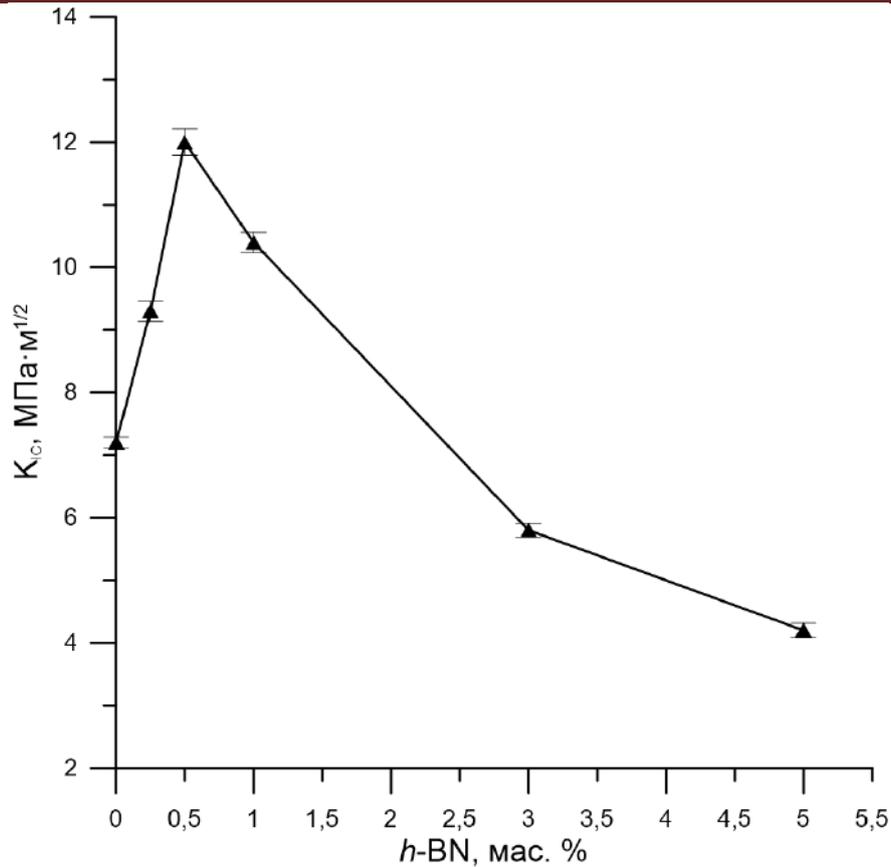


Рис. 1. Влияние включений гексагонального нитрида бора на трещиностойкость керамики (Y-TZP) (h -BN).

На основании результатов исследования структурно-фазового состояния и вязкости разрушения керамики Y-TZP и керамики (Y-TZP) (h -BN) можно сделать вывод о том, что увеличение вязкости разрушения при введении в керамическую матрицу низко модульных включений h -BN обусловлено одновременной реализацией механизмов Кука-Гордона, приводящему к торможению трещин на относительно слабых межфазовых границах матрица - низко модульные включения и мартенситным превращением в ZrO_2 .

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Соглашения № 14.584.21.0026 (RFMEFI58417X0026).

DOI: 10.17223/9785946218412/85

МЕХАНИЗМЫ ДЕФОРМАЦИИ АУСТЕНИТНОЙ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ ПРИ
ХОЛОДНОЙ ПРОКАТКЕ

¹Сурикова Н.С., ¹Панин В.Е., ¹Наркевич Н.А., ¹Власов И.В.,
¹Гордиенко А.И., ²Волочаев М.Н.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Институт физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск

В работе методами механических испытаний и структурных исследований изучены деформационная структура, механические свойства и механизмы пластической деформации аустенитной нержавеющей стали 12Х15Г9НД после интенсивной холодной прокатки. Исследование микроструктуры и фазового состава стали проводили с помощью рентгеноструктурного анализа и электронной просвечивающей микроскопии (ДРОН-7 и JEM-2100, Hitachi HT7700 ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ и ФИЦ КНЦ). Механические характеристики стали определяли путем одноосного растяжения на модифицированной установке типа «Поляни» со скоростью $5 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ в интервале температур $-90 \div 20^\circ \text{ С}$.

Рентгеноструктурный анализ и проведенные исследования температурной зависимости электросопротивления показали, что после закалки в холодную воду от высоких температур и при медленном охлаждении до температуры жидкого азота (-196° С), сталь 12Х15Г9НД не испытывает мартенситных превращений, оставаясь в аустенитном состоянии также, как при комнатной температуре. На дифрактограммах, полученных от исходных образцов стали присутствуют только отражения γ -фазы. Она имеет метастабильную аустенитную структуру [1], в которой при $T \leq 20^\circ \text{ С}$ развиваются деформационные мартенситные превращения.

Особенности мартенситных превращений изучали после холодной продольной прокатки стали в исходном состоянии и после поперечно-винтовой прокатки (ПВП) в интервале температур $950 \div 700^\circ \text{ С}$. В результате ПВП в аустените формируется неоднородная по сечению прутка субмикроструктурная структура, которая характеризуется более высокой твердостью и прочностью, достаточной пластичностью и хорошей стабильностью [2]. В исходном состоянии сталь содержит высокую долю специальных (двойниковых) границ зерен, которые более проницаемы для деформационных сдвигов, чем границы общего типа. Наличие таких границ обусловлено низкой энергией дефекта упаковки, что связано с присутствием в составе стали примеси азота в количестве 0,2 вес.% [3].

Электронная микроскопия показала, что в исходном состоянии и после ПВП в стали наблюдается одна и та же последовательность деформационных мартенситных $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha'$ превращений. На начальных степенях деформации в разных зернах аустенита обнаружено раздельное образование ε - и α' -фаз, в соответствии с [4], где показано, что последовательность $\gamma \rightarrow \varepsilon$, $\gamma \rightarrow \varepsilon \rightarrow \alpha'$ и $\gamma \rightarrow \alpha'$ превращений в поликристаллах метастабильных сталей зависит от кристаллографической ориентации зерна относительно приложенной нагрузки. Первые зародыши ε -мартенсита появляются на дислокациях $a/2[110]$, диссоциированных на две частичные дислокации Шокли с образованием дефекта упаковки. С увеличением степени деформации объемная доля пластин ε -мартенсита растет и в них начинают формироваться более мелкие пластины α' -мартенситной фазы. При близких степенях холодной деформации ($\sim 0,25-0,3$) в образцах стали с первоначально исходным состоянием наблюдается более грубая морфология мартенситных пластин, чем после ПВП. Это связано с большим размером зерна в исходном состоянии ($\sim 20 \text{ мкм}$, по сравнению с $0,6 \text{ мкм}$ после ПВП) и отсутствием субструктуры – субзерен, дислокационных скоплений, дефектов упаковки.

При дальнейшем увеличении степени деформации продолжается фрагментации материала и уменьшается доля ε -мартенсита. При деформации 1,8 в материале формируется нанокристаллическая структура, состоящая в основном из зерен α' -фазы. Рентгеноструктурные исследования показывают, что содержание α' -мартенсита составляет $\sim 86\%$, остальное – аустенитная фаза, размер ОКР примерно равен 40 нм . При электронно-микроскопическом исследовании тонких фольг обнаруживается небольшая доля ε -фазы.

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

При исследовании механических свойств показано, что образцы стали в нанокристаллическом состоянии при комнатной температуре показывают высокие предел текучести $\sigma_{0,1} \sim 1400$ МПа, предел прочности $\sigma_b \sim 2000$ МПа и пластичность до разрушения $\delta \sim 6\%$. Для увеличения пластичности образцы отжигали при температурах 400-600⁰С, при этом часть мартенситной α' -фазы испытывала обратный переход $\alpha' \rightarrow \gamma$, оставляя свою субструктуру – границы пластин и дислокации. Такая обработка позволила повысить пластичность материала, не снижая значительно прочностные характеристики в интервале температур $-90 \div 20^0$ С.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-08-00221 и частично в рамках ПФНИ ГАН на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Филиппов М.А., Литвинов В.С., Немировский Ю.Р. Стали с метастабильным аустенитом. – М.: Металлургия, 1988. 256 с.
2. Сурикова Н.С., Панин В.Е., Наркевич Н.А., Мишин И.П., Гордиенко А.И. Создание поперечно-винтовой прокаткой многоуровневой иерархической мезосубструктуры и ее влияние на механическое поведение аустенитной стали. //Физическая мезомеханика. 2018. Т. 21. №3. С. 36-47.
3. Свяжин А.Г., Капуткина Л.М. Стали, легированные азотом. //Известия вузов. Черная металлургия. 2005. №10. С. 36-46.
4. Киреева И.В., Чумляков Ю.И. Пластическая деформация монокристаллов аустенитных нержавеющей сталей и ГЦК-высокоэнтропийных сплавов. – Томск: Изд-во НТЛ. 2018. 200с.

DOI: 10.17223/9785946218412/86

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЦИКЛИЧЕСКОГО НАГРУЖЕНИЯ НА
СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИЗКОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ**

¹Надежкин М.В., ^{1,2}Зуев Л.Б., ^{1,3}Шляхова Г.В., ¹Бочкарёва А.В., ¹Полякова Е.С.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский Государственный университет, Томск*

³*Северский технологический институт – филиал НИЯУ МИФИ, Северск*

При эксплуатации изделий и деталей машин большинство из них испытывают воздействие переменных нагрузок, что может являться причиной их усталостного износа – постепенного или внезапного разрушения материала [1]. Изучение влияния усталостного износа на структуру и механические свойства сталей и сплавов даёт возможность прогнозировать поведение металлов в условиях повышения требований надёжности при эксплуатации машин и механизмов.

В работе представлены результаты экспериментальных исследований изменения механических свойств низкоуглеродистой стали в зависимости от количества циклов нагружения ($N=5 \times 10^3; 40 \times 10^3; 80 \times 10^3; 100 \times 10^3$) на сервогидравлической усталостной машине Biss UTM 150. Металлографические исследования поверхности стальных образцов проводились с использованием оптического и атомно-силового микроскопов, которые позволяют получать результаты анализа поверхности с высоким пространственным разрешением [2, 3], а также устанавливать зависимость усталостного износа материалов от величины циклических нагрузок. Образцы для исследований были изготовлены в форме двойной лопатки с рабочей частью $50 \times 10 \times 4$ мм.

Установлено, что с ростом количества циклов предел текучести σ_{T10} не изменился. Значительным оказалось изменение пластических свойств металла. При увеличении количества циклов N от 80×10^3 до 100×10^3 величина деформации до разрушения снизилась в 3 раза, при этом величина предела прочности изменилась не более, чем на 4 % от значения в исходном состоянии. С увеличением циклов нагружения исследуемых образцов до $N=5 \times 10^3$ твердость (HV) растёт и далее остается неизменной независимо от количества последующих циклов.

В качестве оценочной характеристики ОМ и АСМ служили полосы скольжения, возникающие на шлифе материала. Форма ферритных зерен с увеличением количества циклов изменяется, зерна феррита приобретают волокнистую структуру - наблюдаются повороты зерен относительно друг друга, появляются микроразрывы.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Государственной академии наук на 2017-2020 гг. и частично поддержана грантом РФФИ № 17-08-00751-а.

1. Ромашев М.А. Изменение структуры и повреждаемости поверхности стали в процессе нагружения//Успехи современного естествознания. – 2015. – № 1 (1). – С. 67-70.

2. Зуев Л.Б., Шляхова Г.В. О возможностях атомно-силовой микроскопии в металлографии углеродистых сталей//Материаловедение. – 2014. – № 7. – С. 7-12.

3. Shlyakhova G.V., Zuev L.B., Bochkareva A.V. Structure of carbon steel under plastic deformation// IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2018. – Vol. 447 (1). – P. 012064.

DOI: 10.17223/9785946218412/87

**ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ТЕКСТУРЫ НА ЭВОЛЮЦИЮ
ДЕФОРМАЦИОННОГО РЕЛЬЕФА И ЛОКАЛИЗАЦИЮ ПЛАСТИЧЕСКОЙ
ДЕФОРМАЦИИ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ТИТАНЕ**

^{1,2}Емельянова Е.С., ²Романова В.А., ²Балохонов Р.Р., ^{1,2}Сергеев М.В.

¹*Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Ультразвуковая обработка (УЗО) технически чистого титана приводит к измельчению зёрен и формированию базисной текстуры в поверхностных слоях. Однако экспериментальные методики не позволяют рассмотреть влияние каждого из этих факторов в отдельности на локализацию пластической деформации, эволюцию напряжённо-деформированного состояния и деформационного рельефа. В настоящей работе численно исследовано влияние текстуры, характерной для УЗО модифицированного поликристаллического титана, на формирование и эволюцию деформационного рельефа в процессе одноосного растяжения.

Трёхмерные модели поликристаллического титана с явным учетом структуры и текстуры разработаны на основе физической теории пластичности кристаллов, учитывающей анизотропию упруго-пластических свойств, связанную с кристаллическим строением. В рамках модельных представлений поликристаллические конгломераты рассматривались как совокупность монокристаллов с различной кристаллографической ориентацией относительно системы координат образца. Геометрические модели микроструктур сгенерированы методом пошагового заполнения на основе экспериментальных данных. Краевая задача в динамической постановке решалась методом конечных элементов с использованием пакета ABAQUS/Explicit.

Установлено, что на высоту и ширину мезоскопических рельефных складок, образованных за счет коллективного смещения групп зерен, значительно влияет текстура поверхностного слоя. В материале без текстуры рельеф поверхности гораздо более выражен, чем в материале с базисной текстурой. Выраженная базисная текстура поверхностного слоя обуславливает анизотропию свойств, что приводит к менее выраженным смещениям в направлении, перпендикулярном свободной поверхности, на микро- и мезомасштабах.

Работа выполняется в рамках государственного задания на 2017-2020 гг. Исследование деформационного рельефа технически чистого титана выполнялось в рамках проекта РФФИ № 17-08-00643 А.

DOI: 10.17223/9785946218412/88

**МИКРОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ
АДДИТИВНЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ**

¹Романова В.А., ¹Балохонов Р.Р., ^{1,2}Емельянова Е.С.,
³Зиновьева О.С., ³Зиновьев А.В., ³Плошихин В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

³*Бременский университет, Бремен*

Технологические особенности производства аддитивных материалов приводят к формированию сложной микроструктуры, характеризующейся наличием границ раздела разного типа, масштаба и геометрии, механической и кристаллографической текстур. Анизотропия упруго-пластических свойств аддитивных материалов проявляется на всей иерархии масштабов от микро- до макро, что делает деформационный отклик таких материалов трудно прогнозируемым в рамках классических подходов макроскопической механики. Для более глубокого понимания механизмов деформации и разрушения аддитивных материалов необходим анализ деформационных процессов на микро- и мезоуровнях и оценка их вклада в макроскопический отклик образцов. В настоящей работе исследование деформационного поведения микрообъемов аддитивных алюминиевых сплавов проводится в рамках подхода физической мезомеханики, предполагающего учет физических механизмов пластической деформации на микроуровне, с одной стороны, и морфологических особенности микроструктуры, с другой стороны.

Трехмерные модели поликристаллических структур, характерных для алюминиевых сплавов, изготовленных методом селективной лазерной плавки, были сгенерированы методом пошагового заполнения на основе экспериментальных данных. Определяющие соотношения для описания механического отклика зерен строились на основе физической теории пластичности кристаллов, учитывающих анизотропию упруго-пластических свойств, связанную с кристаллическим строением, и дислокационные механизмы пластической деформации зерен. Трехмерные поликристаллические модели были интегрированы в конечно-элементный пакет ABAQUS для решения краевых задач методом конечных элементов.

Для анализа влияния механической и кристаллографической текстур на эволюцию напряженно-деформированного состояния проведены расчеты для моделей с равноосными и вытянутыми зёрнами, характеризующиеся кубической текстурой различной остроты. Показано, что кристаллографическая текстура оказывает более сильное влияние на локализацию пластической деформации, чем форма зерен.

Работа выполнена в рамках совместного проекта ДФГ-РФФИ (ННИО-а №18-501-12020).

DOI: 10.17223/9785946218412/89

CRITERION OF INTERFACIAL BRIDGED CRACKS INITIATION AND QUASISTATIC GROWTH

Mikhail Perelmuter

*Institute for Problems in Mechanics of RAS, Moscow, Russia
perelm@ipmnet.ru*

To model the adhesion fracture toughness of the interfacial junctions the bridged crack concept is used. In the frames of this concept is assumed: there are bonds between joined materials (the interface layer); a zone of weakened bonds in this layer is considered as the interface crack with distributed nonlinear spring-like bonds between crack surfaces (bridged zone). Bonds properties define the stress state at the crack bridged zone and, hence, the reliability and the fracture toughness of the interfacial junction. In a general case, the size of bridged zone of the interface crack is comparable to the whole crack length. The conditions of a crack limit equilibrium and quasistatic growth for the case of the crack with bridged zone of large scale should be considered to model quantitatively the bridging effects. The quantitative analysis of the interface bridged crack growth consists of the following steps: 1) development of the bond deformation law; 2) evaluation of the crack opening and stresses around of the crack; 3) development and application of the nonlocal criterion of bridged crack growth to analyze the interfacial junction fracture parameters.

For given bonds deformation law the crack opening and bridged stresses can be defined on basis of the singular integral-differential equations (SIDE) method or boundary elements method (BEM), [1, 2].

The non-local fracture criterion [1, 3, 4] is used to evaluate the fracture toughness and the critical external loading in the frames of the bridged crack model. The state of the crack limit equilibrium corresponds to the condition (Π is the total potential energy, $w(\varepsilon_{ij})$ is the density of the deformation energy, ε_{ij} are the components of the strain tensor; t_i, u_i are the tractions and displacements at the body boundary s_e ; $\Phi(u)$ is the density of the strain energy of the bonds in the crack bridging zones, u is the crack opening at the bridging zones of area s_i , ℓ is a crack length, G_m the material intrinsic toughness)

$$-\frac{\partial \Pi}{\partial \ell} = -\underbrace{\frac{\partial}{\partial \ell} \left[\int_v w(\varepsilon_{ij}) dv - \int_{s_e} t_i u_i ds \right]}_{G_{tip0}(d, \ell)} - \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial \ell} \int_{s_i} \Phi(u) ds + G_m \right]}_{G_{bond}(d, \ell)} = 0 \quad (1)$$

The terms in this relation represent the strain energy release rate at creation of a new crack surface $G_{tip}(d, \ell)$ and the rate of the energy absorption in the crack bridging zone, $G_{bond}(d, \ell)$, respectively. Note, that within the framework of the model the rate of the energy absorption depends on the bridging zone size and bond characteristics. The equilibrium bridging zone size is not assumed to be constant during cracks growth. It can be determined from condition (1) while the searching for the critical load needs additional conditions of the bond rupture. In the general case the strain energy release rate can be defined through the stress intensity factors, [1, 4].

The condition of the crack tip limit equilibrium (1) can be rewritten as follows

$$G_{tip}(d_{cr}, \ell) = G_{bond}(d_{cr}, \ell) \quad (2)$$

Condition (2) is necessary but insufficient for searching for a limit equilibrium state of the crack tip and the bridging zone. This condition enables us to determine the bridging zone size d_{cr} at the crack tip limit equilibrium state for given level of the external loads. To search for the limit state of both the crack tip and the bridging zone trailing edge within the framework of the model one should introduce an additional condition, e.g., the condition of bonds limit stretching at the trailing edge of the bridging zone $x_0 = \ell - d_{cr}$ (δ_{cr} is the bond rupture length)

$$u(x_0) = ([u_x(x_0)]^2 + [u_y(x_0)]^2)^{1/2} = \delta_{cr} \quad (3)$$

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

The regimes of the bridged zone and the crack tip equilibrium and quasi-static growth can be considered on basis of these two fracture conditions:

1) the crack tip propagates and the size of the bridged zone d increases without rupture of the bonds (subcritical crack growth)

$$G_{tip}(d, \ell) \geq G_{bond}(d, \ell), \quad u(\ell - d) < \delta_{cr} \quad (4)$$

2) the size of the bridged zone decreases due to rupture of the bond without the crack tip propagation (subcritical crack growth)

$$G_{tip}(d, \ell) < G_{bond}(d, \ell), \quad u(\ell - d) \geq \delta_{cr} \quad (5)$$

3) the crack tip propagates with simultaneous bond rupture at the trailing edge of the bridged zone

$$G_{tip}(d, \ell) \geq G_{bond}(d, \ell), \quad u(\ell - d) \geq \delta_{cr} \quad (6)$$

The last case corresponds to quasi-static crack growth because the both fracture conditions are fulfilled.

The critical external loads, σ_{cr} , the bridged zone size d_{cr} and the adhesion fracture resistance at the crack limit equilibrium state for the given crack length and the bond characteristics can be determined from the solution of Eqs. (2) and (3).

The main features of the nonlocal fracture criterion are the accounting of energy consumed by bonds during cracks growth and the analysis on this ground of non self-similar crack growth. This criterion has implemented in the frames of the bridged crack model with assumption of singularity at the crack tip, but it includes the cohesive model as the special case, see [3, 4]. The application of the nonlocal fracture criterion will be helpful for cracks filled with bonds in the most part of its length. The effects which are connected with bonds deformation accounting are the most noticeable in this case. The nonlocal criterion consists of two conditions and the appropriate equations are defined by several physical-mechanical parameters or functions, in dependence on bonds deformation law which can be defined experimentally or obtained starting from the micromechanical modeling. In the simplest cases (uniform bonds stresses or linear-elastic bonds) the criterion contents only two experimentally defined parameters 1) the maximal bonds stress) and 2) the critical crack opening and can be regarded as the two-parametric fracture criterion, as in [1].

This work is supported by the Russian Science Foundation under grant No. 19-19-00616.

1. Goldstein R.V., Perelmuter M.N. Modeling of bonding at the interface crack // International Journal of Fracture. 1999. V. 99. P. 53-79.
2. Perelmuter M. Boundary element analysis of structures with bridged interfacial cracks // Computational Mechanics. 2013. V. 51. No. 4. P. 523-534.
3. Perelmuter M. Nonlocal criterion of bridged cracks growth: Weak interface // Journal of the European Ceramic Society. 2014. V. 34. No. 11. P. 2789-2798.
4. Perelmuter M. Nonlocal criterion of bridged cracks growth: analytical analysis // Acta Mechanica. V. 226. No. 2, P. 397-418.

DOI: 10.17223/9785946218412/90

**ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ ПОРИСТОЙ КОРУНДОВОЙ
КЕРАМИКИ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ БЛОЧНОЙ СТРУКТУРОЙ**

¹Григорьев М.В., ^{1,2,3}Кульков С.Н.

¹*Федеральное государственное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

³*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

Актуальной и интересной научной темой является изучение систем с иерархической, многоуровневой пористостью. Перспективной с этой точки зрения представляется технология синтеза материалов с пространственными, взаимопроникающими элементами, напоминающими структуру перламутровых раковин, поскольку они могут обеспечить особый характер деформирования по сравнению с традиционными пористыми материалами.

Целью настоящей работы является изучение особенностей деформационного поведения при квазистатическом сжатии корундовой керамики с пространственной пористостью, формирующей в керамике блочную структуру.

Показано, что в корундовой керамике при отжиге порообразователя из СВМПЭ формируется пространственная, взаимопроникающая поровая структура, которая состоит из крупных и мелких пор, и протяженных поровых каналов, которые соединяя между собой крупные поры, и разбивая материал на микроблоки соединенные между собой перемычками.

Таким образом, исследуемую керамику можно рассматривать как систему со сложной пространственной блочной структурой с ослабленными границами раздела между блоками в виде перемычек в поровых каналах.

При деформации такой керамики, наблюдается особое деформационное поведение блочной структуры. Микроанализ торцевой отполированной поверхности образца на разных стадиях нагружения показал, что первые трещины в образце появляются при нагрузке $\approx 0,3 \times \sigma_c$ (где σ_c – предел прочности при сжатии), и распространяются по границам между блоками. С дальнейшим ростом приложенного напряжения до $\approx 0,8 \times \sigma_c$, практически по всей площади шлифа происходит накопление микроповреждений, приводящее к распространению трещин по границам блоков и выкрашиванию самих блоков. При этом откликов на кривой нагрузка – перемещение, эти локальные микроразрушения не оставляли.

Микроскопические исследования РЭМ изображений с поверхности разрушения и с торцевой отполированной поверхности образца показали, что под нагрузкой перемычки между блоками первыми претерпевают разрушение, что приведет к коллапсу поровых каналов между блоками. Результатом такого движения блоков становится увеличение пятна контакта между ними в направлении оси прикладываемого напряжения. Под нагрузкой происходит накопление микроповреждений по всему объему образца, но катастрофических магистральных трещин не образуется. При достижении 80% от предела прочности отдельные блоки материала могут начать движение друг относительно друга вплоть до полного выкрашивания из поверхности образца, но это не оказывает влияния на несущую способность образца в целом.

Таким образом, при деформировании корундовой керамики с пространственной блочной структурой вследствие формирования многочисленных очагов разрушения понижается масштабный уровень разрушения от макроскопического, до мезо- и микромасштабного. Это выражается в локализации деформации в процессе нагружения и движении блоков друг относительно друга, что приводит к выкрашиванию зерен в перемычках на границах блоков и увеличению пятна контакта между блоками в направлении оси сжатия.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, раздел III.23

DOI: 10.17223/9785946218412/91

**ЦИКЛИЧЕСКОЕ СЖАТИЕ С ВОЗРАСТАЮЩЕЙ НАГРУЗКОЙ КОРУНДОВОЙ
КЕРАМИКИ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ БЛОЧНОЙ СТРУКТУРОЙ**

¹Григорьев М.В., ^{1,2,3}Кульков С.Н.

¹*Федеральное государственное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

³*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

Разработан материал на основе корунда в котором была получена блочная структура за счет формирования в материале сложной пространственной пористости. Были совмещены такие методы образования пористости как: недоспекание (когда формируется система пор с размерами соизмеримыми с размерами зерна) введение выгорающих добавок и эффект «зонального обособления». В результате было получено несколько видов пористости – обусловленной межзеренной пористостью, крупной пористостью вследствие введения порообразователя и поровыми каналами, сформированными при зональном обособлении. Таким образом, полученную керамику можно рассматривать как систему со сложной пространственной блочной структурой с ослабленными границами раздела между блоками в лице перемычек в поровых каналах.

Проведенные механические испытания на сжатие показали, что при фиксированных значениях объема порового пространства, керамика с пространственной блочной структурой имеет более высокую прочность на сжатие по сравнению с керамикой с унимодальной пористостью, при этом эффективные модули упругости в этих керамиках сопоставимы.

Цель: исследование деформационного поведения корундовой керамики с пространственной блочной структурой, при последовательных испытаниях на сжатие с ростом нагрузки.

Показано, что кривая «напряжение-деформация» до полного разрушения керамики с пространственной блочной структурой имеет сложный характер и по ней невозможно определить начало появления микроразрушений. Проведенные последовательные испытания на сжатие с возрастающей нагрузкой позволили определить начало появления остаточной деформации (предела пропорциональности). Установлено, что остаточная деформация появляется после нагрузки 13 МПа, что составляет $\approx 0,3 \times \sigma_c$ (где σ_c – предел прочности при сжатии).

Анализ кривой деформирования в области предела пропорциональности показал, что она может быть разбита на три участка с разным наклоном (разным «техническим» модулем при сжатии): по-видимому, первый участок соответствует перемещению сформировавшихся при зональном спекании блоков, обуславливая низкий модуль упругости. На втором участке после разрушения перемычек и схлопывания поровых каналов в направлении оси сжатия материал продолжает упруго деформироваться. На третьем участке, материал переходит после 10 МПа нагрузки в «режим» накопления микрповреждений.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, раздел III.23

DOI: 10.17223/9785946218412/92

**IN-SITU ИЗУЧЕНИЕ ЭВОЛЮЦИИ МЕХАНИЧЕСКИХ ПОВРЕЖДЕНИЙ
СЕГМЕНТИРОВАННОЙ КЕРАМИКИ, МЕТОДОМ КЦИ**

Григорьев М.В., Утяганова В.Р.

*Федеральное государственное учреждение науки Институт физики прочности и
материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

При разработке новых конструкционных керамических материалов необходимо детально исследовать их физико-механические свойства, чтобы найти оптимальный технологический режим их получения, а в условиях эксплуатации – и сократить затраты на оценку текущего механического состояния конструкции и повысить её надёжность. Большой объём информации дала бы картина эволюции формоизменения материала в процессе механического нагружения. В настоящее время для этой цели применяется метод корреляции цифровых изображений (КЦИ), обладающий высокой точностью измерений, хорошим пространственным разрешением и сравнительно простыми алгоритмами обработки данных.

В данной работе метод КЦИ был применен к перспективному керамическому материалу на основе корунда с уникальной пространственной сегментированной структурой, которая создается в нем на стадии спекания за счет добавления выгорающих частиц СВМПЭ и активации механизма «зонального обособления» на стадии отжига пластификатора и выгорающих добавок.

Цель работы: Методом КЦИ изучить в процессе осевого сжатия деформационное поведение сегментированной структуры и ее элементов в керамике на основе оксида алюминия.

За основу были взяты образцы керамики Al_2O_3 с сегментированной структурой и объемом порового пространства 50%. Поровая структура, включала в себя поры трёх видов: крупную пористость со средним размером 120 мкм, мелкую пористость со средним размером 2 мкм и промежуточную пористость, состоящую из протяженных (около 150 мкм) поровых микроканалов, образованных в результате зонального обособления при спекании.

На образцах были приготовлены торцевые шлифы с контрастным выделением сегментированной структуры, за счет заполнения графитом порового пространства. Образцы нагружали по схеме одноосного сжатия, и производили съёмку шлифованной поверхности с помощью фотоаппарата Nikon D90 каждые 3 секунды, и записывали на жёсткий диск компьютера в виде отдельных файлов.

Предварительная компьютерная обработка серии оптических изображений позволила получить новую серию участков изображения поверхности без лишних деталей, где каждое изображение имело одинаковые размеры. Последующая компьютерная обработка методом КЦИ позволила получить серию полей векторов смещений.

Показано, что уже с самого начала нагружения в центральной части образца формируется трещина. Она быстро растёт по моде I (нормальный отрыв) и охватывает почти всю длину образца, а её берега раскрываются по схеме отрыва. Однако эта трещина не является магистральной и имеет приповерхностный характер. Уникальные свойства данного типа керамики заключаются в высокой толерантности к возникающим в процессе нагружения дефектам, и как следствие возникающей «квазипластической» деформации, носителями которой являются поровые каналы и поры микро- и мезомасштабного уровня. Поэтому трещина начинает постепенно затухать – её длина сокращается. Далее наблюдается многоочаговость процессов деформации и разрушения с элементами вращения отдельных участков, соответствующих отдельным сегментам/блокам материала.

Показано, что на начальном этапе нагружения наибольшей является деформация в центральной части образца, а затем она начинает преобладать в угловых областях образца, что отражает возросшую роль максимальных касательных напряжений. При этом деформация в остальных областях постепенно выравнивается.

Работа выполнена в рамках гранта Президента РФ МК-6098.2018.8.

DOI: 10.17223/9785946218412/93

**СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПОРИСТОЙ КЕРАМИКИ ПОЛУЧЕННОЙ
ПРИ РАЗНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ СПЕКАНИЯ**

^{1,2}Кульков А.С., ^{1,2}Смолин И.Ю., ¹Микушина В.А.

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Исследование микроструктуры образцов керамики позволяет установить закономерность изменения размера пор и зерен, а также их распределения по размерам в зависимости от температуры спекания в диапазоне от 1350°C до 1600°C.

Одним из главных параметров микроструктуры для керамик является пористость. Пористость была определена двумя способами: геометрическим и посредством программного обеспечения ImageJ по изображениям, полученным при помощи РЭМ.

Пористость образцов составила 33%, 25% и 17% соответственно для температур спекания 1400°C, 1500°C, 1600°C. Показано, что она уменьшается при увеличении температуры спекания примерно на 8% на каждые 100°C. Средний размер пор, определенный на основе анализа РЭМ изображений с помощью ImageJ составляет 3.8, 2.5 и 3.9 мкм для температур от 1350 до 1600°C соответственно. Размеры пор имеют разный характер распределения в зависимости от температуры спекания. Так, для 1400 градусов их размеры варьируются от 1 до 5 мкм, а максимум наблюдается при 2.5 мкм, в то время как для 1500 размеры пор от 0.5 до 2 мкм, с максимумом меньше 1 мкм. Для 1600 градусов картина похожая, но максимум размера пор располагается при 2.7 мкм.

Средний размер пор при повышении температуры спекания сначала уменьшается, потом увеличивается. По-видимому, это связано с коалесценцией пор при больших температурах спекания. Результаты расчетов стандартного отклонения размера пор показывают незначительное его увеличение при температуре спекания 1500°C (2.3 мкм), в то время как для температуры спекания в 1400 и 1600°C стандартное отклонение практически одинаковое – 1.9 и 1.8 мкм.

Анализ распределений зерен по размерам в зависимости от температуры спекания образцов показывает, что для каждой температуры присутствует максимум при 2-3 микрон. Однако для температур в 1400 и 1500 градусов основная масса зерен имеет размеры от 1 до 4 мкм, а для температуры в 1600 градусов он увеличивается до 6 мкм.

Механические испытания на трехточечный изгиб позволили получить пределы прочности. Показано, что с уменьшением пористости в образцах предел прочности увеличивается. Однако, явной корреляции величины прочности образцов с размерами структурных элементов - пор и зерен, выявить не удалось. Результаты испытаний на трехточечный изгиб показывают, что предел прочности растет нелинейно при повышении температуры спекания от 1350 до 1600°C.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23 и при поддержке Программы повышения конкурентоспособности ТГУ.

DOI: 10.17223/9785946218412/94

ДЕФОРМАЦИЯ УМЗ МЕДИ М1 ПРИ НАНОИНДЕНТИРОВАНИИ

Филиппов А.В., Тарасов С.Ю

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Исследование деформационного поведения материалов на микро- и наномасштабном уровнях является важной задачей современного материаловедения. С этой целью часто применяют метод наноиндентирования, как наиболее информативный и точный.

Ранее были выполнены исследования для нанокристаллической и УМЗ меди с применением наноиндентирования пирамидкой Берковича. На основе этих исследований установлено образование наплывов в УМЗ образце с размером зерен около 300 нм, тогда как в нанокристаллическом образце наплывов не выявлено. Также наплывы на периферии отпечатков выявлены в образцах УМЗ алюминия.

Целью данной работы является исследование влияния структурного состояния меди М1 на её деформационное поведение при наноиндентировании.

Образцы УМЗ меди получены методом равноканального углового прессования при комнатной температуре. Исследование микроструктуры проводилось методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) при помощи микроскопа JEM-2100 (JEOL Ltd, Japan). При проведении ПЭМ исследований использовались режимы получения светлопольных изображений и микродифракционных картин. Заготовки фольг вырезались механическим способом таким образом чтобы, плоскости фольг были перпендикулярны направлению деформации при последнем проходе в процессе ЕСАР. Наноиндентирование выполнено при комнатной температуре.

Для анализа влияния РКУП на микромеханические свойства материала использовалось индентирование четырехгранной пирамидкой Виккерса. Характер нагрузки-перемещение кривых практически одинаков для всех образцов. При постоянной нагрузке и скорости внедрения индентора видно, что между исходным образцом и образцом после 1го прохода РКУП нет существенных различий. Существенный прирост микротвердости обеспечивается после 4х и 12ти проходов РКУП. Модуль упругости увеличивается после одного прохода РКУП. Дополнительные проходы не оказывают существенного воздействия на величину Е.

На основе анализа 3D изображений поверхностей отпечатков на поверхности крупнокристаллического и ультрамелкозернистых образцов определено образование наплывов по краям отпечатков. Анализ профилей отпечатков указывает на схожий характер изменения величин pile-up and hc/hmax (отношения глубины отпечатка от поверхности образца hc к максимальной глубине отпечатка hmax с учетом размера pile-up). Отношение hc/hmax характеризует меру увеличения площади контакта индентора с образцом и с изменением механизма деформации материала с различной структурой. Сравнение микроструктуры УМЗ образцов с размерами наплывов указывает на схожий порядок размерности структуры и высоты наплыва (~600 нм для образца после 1 прохода РКУП, ~500 nm для образца после 4 проходов РКУП и ~ 350nm для образца после 12 проходов РКУП).

В результате выполненных исследований установлено, что наибольший прирост нанотвердости достигается после 12 проходов РКУП. В тоже время модуль упругости существенно не изменяется в результате формирования УМЗ структуры. Исследования топографии поверхности отпечатка указывает на формирование существенных наплывов по периферии отпечатка. Наибольший наплыв получен для образца после одного прохода РКУП, а наименьший после 12 проходов. Размеры наплывов УМЗ образцов сопоставимы с размерностью их структуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Российской академии наук на 2013-2020 гг. (проект № III.23.2.4).

DOI: 10.17223/9785946218412/95

СПЕКЛ-СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ОБРАЗЦОВ СПЛАВОВ ВТ1-0 И
Zr-1Nb В И МИКРО- И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ СОСТОЯНИЯХ ПРИ
ДЕФОРМАЦИИ

^{1,2}Шаркеев Ю.П., ^{3,4}Клопотов А.А., ³Потекаев А.И., ³Устинов А.М.,
¹Ерошенко А.Ю., ¹Легостаева Е.В., ¹Белявская О.А.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

³Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

⁴Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск
sharkeev@ispms.tsc.ru

Создание биоинертных материалов на основе Ti, Zr и Nb с необходимыми физико-механическими свойствами при их использовании в медицине относится к важной проблеме [1]. Один из подходов, который позволяет повышать комплекс их физико-механических свойств основан на создании ультрамелкозернистого (УМЗ) или наноструктурного (НС) состояний методами интенсивной пластической деформации (ИПД) [2].

В настоящее время для определения общих закономерностей при деформации ультрамелкозернистых сплавов активно используют визуализацию микросмещений на поверхности материалов в процессе деформации на основе применения трехмерной цифровой оптической системы Vic-3D [3].

Цель данной работы - на мезо- и макромасштабном уровнях исследовать *in situ* методом корреляции цифровых изображений эволюцию полей деформаций сплавов ВТ1-0 и Zr-1Nb в микро- и ультрамелкозернистом состояниях при деформации растяжением.

Измерения поверхностного деформирования образцов проводили при помощи цифровой оптической системой Vic-3D на основе метода корреляции цифровых стереоскопических изображений, в результате определены относительные деформации (ϵ_{xx} – по оси X, ϵ_{yy} – по оси Y, ϵ_{xy} – деформации сдвига) [3]. Распределение полей смещений на поверхности получено в результате объединения изменений в микрообласти. Это достигнуто при помощи спекл-структуры, созданной на поверхности образцов [3].

На рис. 1 и 2 приведены деформационные кривые для сплавов Zr-1Nb и ВТ1-0 в микрокристаллическом и субмикрокристаллическом состояниях. Видно, что в субмикрокристаллическом состояниях сплавы обладают более высокими прочностными свойствами, чем в микрокристаллическом состоянии. Это коррелирует с эволюцией распределений деформационных полей на поверхности сплавов при деформации растяжением (рис. 3, 4).

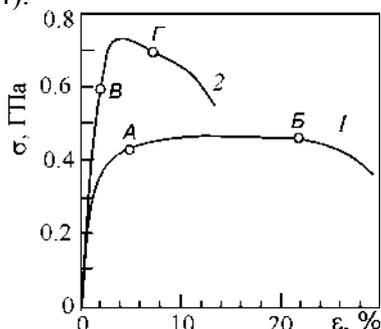


Рис. 1. Диаграммы деформирования для образцов сплава Zr-1Nb в микрокристаллическом (I) и субмикрокристаллическом (II) состояниях. Точками A и B выделены состояние на диаграмме $\sigma=f(\epsilon)$ для которых на рис. 3 приведены картины распределений деформационных полей

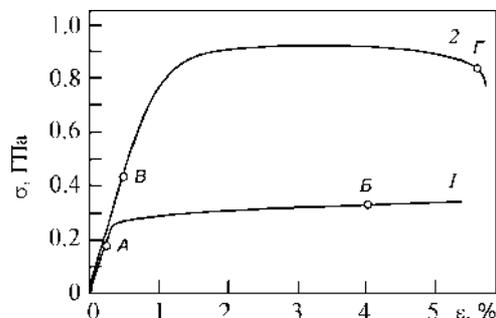


Рис. 2. Диаграммы деформирования для образцов сплава ВТ1-0 в микрокристаллическом (I) и субмикрокристаллическом (II) состояниях. Точками A и B выделены состояние на диаграмме $\sigma=f(\epsilon)$ для которых на рис. 4 приведены картины распределений деформационных полей

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

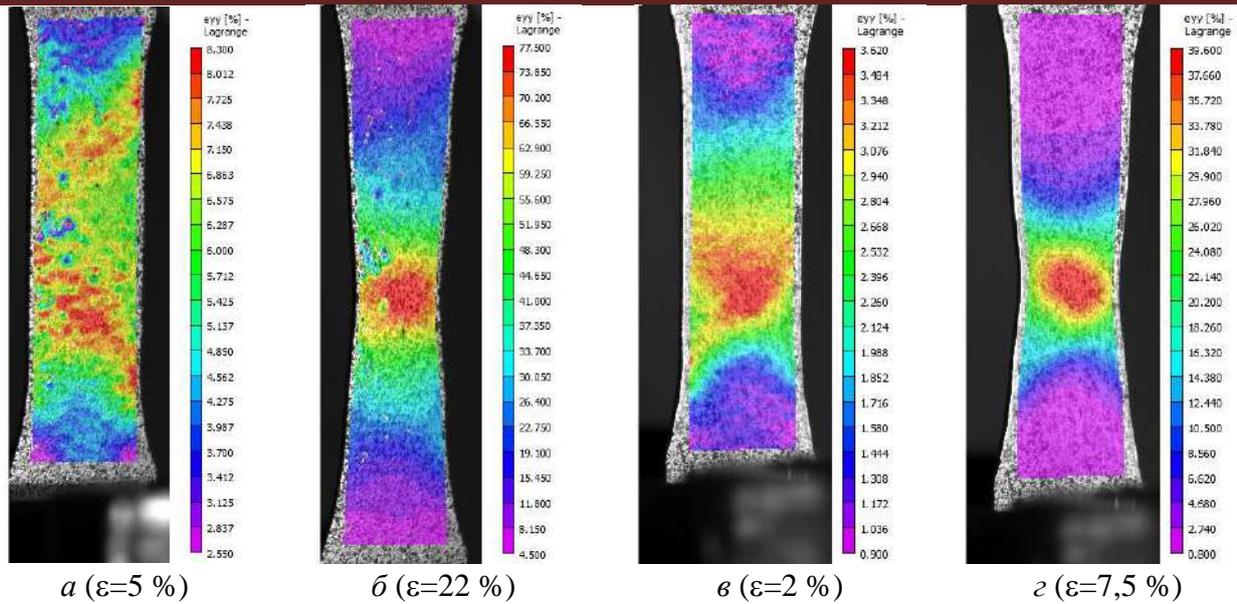


Рис. 3. Картины распределений вертикальных относительных деформаций ε_{YY} поверхности образца сплава Zr-1Nb в микрокристаллическом (*a, б*) и субмикрокристаллическом (*в, з*) состояниях. Этим картинам соответствуют точки А, Б, В, Г на деформационных кривых на рис.1

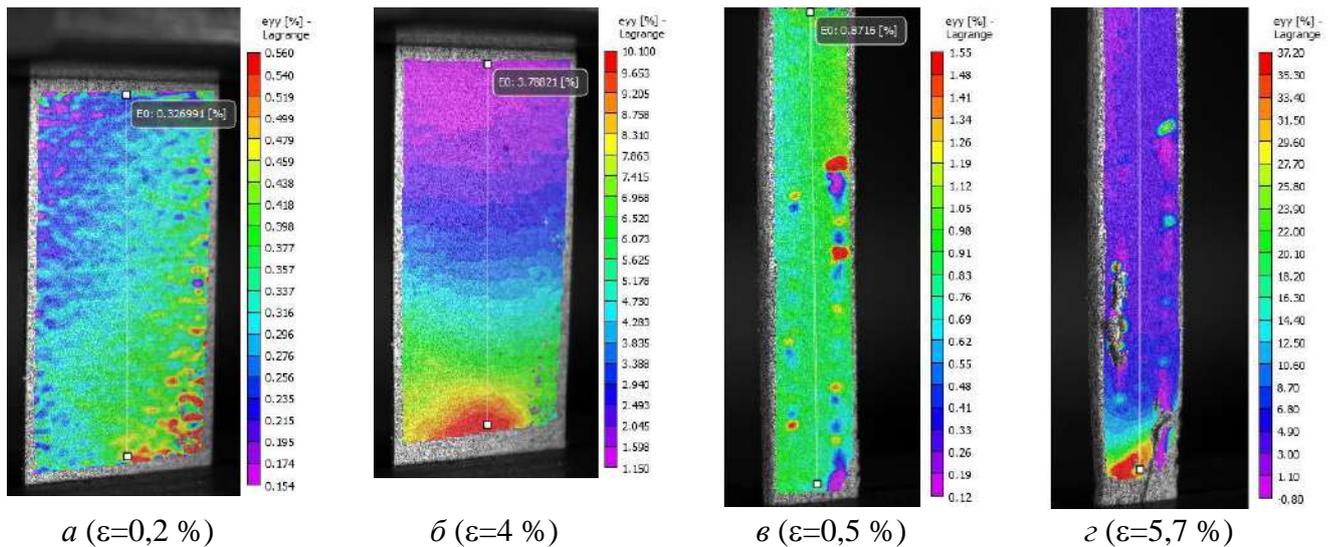


Рис. 4. Картины распределений вертикальных относительных деформаций ε_{YY} поверхности плоского титанового сплава VT1-0 в микрокристаллическом (*a, б*) и субмикрокристаллическом (*в, з*) состояниях. Этим картинам соответствуют точки А, Б, В, Г на деформационных кривых на рис.2

1. Шаркеев Ю.П., Скрипняк В.А., Вавилов В.П. и др. Особенности микроструктуры, деформации и разрушения биоинертных сплавов на основе циркония и титан-ниобия в различных структурных состояниях. Изв. ВУЗов. Физика. 2018. Т.61, №9. С. 149-158.
2. Шляхова Г. В., Ерошенко Л. Ю., Данилов В.И., Шаркеев Ю.П., Толмачев Л. И. Микроструктура и особенности разрушения ультрамелкозернистого титана VT1 -0, полученного методом абс-прессования. Деформация и разрушение материалов. 2012. №9. С. 26-31.
3. Устинов А.М., Клопотов А.А., Потекаев А.И. и др. Особенности разрушения при деформации растяжением клевого соединения сталь/сталь // Известия АлтГУ. Физика. - 2019. - № 1 (105). - С. 50-61.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программ фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2017-2020 годы, Программа Ш.23.2.

DOI: 10.17223/9785946218412/96

**ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ КЕРАМИКИ НА
ОСНОВЕ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ МЕТОДОМ КОРРЕЛЯЦИИ ЦИФРОВЫХ
ИЗОБРАЖЕНИЙ**

Савченко Н.Л., Кибитки В.В, Григорьев М.В.
*Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

Деформационное поведение пористых хрупких сред, в частности керамик, геоматериалов и др., в настоящее время детально изучено в основном для систем с унимодальной пористостью и относительно узким распределением пор по размерам.

При создании пористых керамических материалов наиболее перспективным направлением считается синтез керамик с иерархической поровой структурой с пространственными, взаимопроникающими структурами, имеющими различную конфигурацию (ячейки, каналы, оболочки и др.), поскольку подобные элементы структуры могут обеспечить особый характер деформирования иерархически организованных структур по сравнению с традиционными хрупкими материалами. Тем не менее, подобных исследований явно недостаточно ввиду сложности получения таких систем.

При исследовании процесса деформации и разрушения материалов обычная микроскопия не всегда может визуализировать дефекты, поскольку она обычно полагается на разницу контраста между открытой трещиной и смежным твердым материалом. Метод корреляции цифровых изображений позволяет получать измерение полного поля смещений во время деформации материала. Недавние примеры применения метода корреляции цифровых изображений включают исследования зарождения и роста хрупкой трещины в графите, усталостного растрескивания в карбиде кремния, зернограничного разрушения плотного оксида алюминия.

В этой работе сообщается о применении метода корреляции цифрового изображения для изучения процессов деформации и разрушения керамики на основе оксида алюминия с иерархической поровой структурой.

Получены образцы керамики Al_2O_3 с иерархической и унимодальной поровой структурой. Исследованы особенности их структуры, механических свойств и деформационного поведения при сжатии. Показано, что полученная иерархическая поровая структура вызывает образование иерархической деформационной структуры в объеме керамики Al_2O_3 и приводит к уменьшению масштаба процессов разрушения от макромасштабного в случае керамики с унимодальным распределением пор по размерам до микромасштабного разрушения, сравнимого с размерами блоков, образовавшихся при спекании.

Компьютерная обработка оптических изображений поверхности, последовательно зафиксированных в процессе нагружения образца Al_2O_3 с иерархической поровой структурой показала, что поле векторов необратимого смещения ведет себя весьма неоднородно. Помимо общего тренда движения векторов в стороны перпендикулярные прилагаемой нагрузке, наблюдается многоочаговость процессов деформации и разрушения с элементами вращения отдельных участков, соответствующих отдельным сегментам/блокам материала. Распределение локальных компонент тензора деформации также свидетельствует о наличии областей локализованной деформации, относительно равномерно распределённой по всей исследуемой поверхности образца.

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РАЗРУШЕНИЯ
ПЛАСТИЧНЫХ ТЕЛ С ТРЕЩИНАМИ**

Дерюгин Е.Е.

*Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Russia, Tomsk
dee@ispms.tsc.ru*

В линейной механике разрушения хорошо разработан аппарат для определения критериев разрушения хрупких материалов. Однако до настоящего времени встречаются большие математические и вычислительные трудности, связанные с учетом влияния пластической деформации на поле напряжений для тел с трещинами [1, 2]. В данной работе предлагается новая модель трещины, учитывающая наличие зоны пластической деформации (ЗПД) вокруг трещины и ее влияние на поле напряжений в твердом теле. Модель позволяет проводить энергетический анализ характеристик разрушения пластичных тел с трещинами.

Трещина с момента зарождения и в процессе распространения всегда окружена слоем пластически деформированного материала. В работе приводится оригинальный метод построения ЗПД вокруг трещины. Модельная трещина представляет собой полость в плоскости в виде эллипса с полуосями a и b под действием внешнего напряжения растяжения σ , направленного вдоль малой полуоси b эллипса (рис. 1).

В целом модель представляет собой семейство вложенных друг в друга так называемых элементов релаксации (ЭР) в виде эллипсов (рис. 1). Контуры эллипсов расположены в слое толщиной h . Каждый ЭР в семействе является самостоятельным элементом эллиптической формы, связанным функционально с элементарной долей внешнего напряжения $d\sigma$ через переменную t : $d\sigma(t) = (\beta+1)\sigma^\beta dt$, где β – числовой параметр. Пластическая деформация внутри данного эллипса вызывает релаксацию внешнего напряжения. Релаксация напряжения $d\sigma(t)$ до нуля внутри эллипса обеспечивает однородное поле пластической деформации с компонентами

$$d\varepsilon_x(t) = -d\sigma(t)/E, \quad d\varepsilon_y(t) = d\sigma(1+2a(t)/b(t))/E, \quad d\varepsilon_{xy}(t) = 0, \quad (1)$$

где E – модуль Юнга (рис. 1). Длины полуосей равны соответственно $a(t) = a + h(1 - t)$, $b(t) = b + h(1 - t)$. Переменная t изменяется в пределах от 0 до 1, a и b – большая и малая полуоси трещины (рис. 1). Согласно принятому определению, значение $t = 0$ соответствует эллипсу, охватывающему ЗПД. Увеличение t соответствует последовательному переходу от внешней границы ЗПД к свободной поверхности трещины. Конкретное значение t выбирает определённый контур семейства. Точка на оси x соответствует контуру ЭР со значением $t = 1 - (x-a)/h$.

На основе известных свойств эллиптического выреза [3, 4], с учетом зависимостей (1), получено уравнение энергии образования трещины длиной $l = 2a$:

$$U = \frac{\pi\sigma^2}{2E} \left[2a^2 + \frac{h(5a+b)}{\beta+2} + \frac{6h^2}{(\beta+3)(\beta+2)} + ba \right]. \quad (2)$$

Уравнение (2) позволяет определять критерии разрушения для пластичных тел в зависимости от геометрических параметров модели (a , b , h) и параметра β , определяющего характер распределения пластической деформации в ЗПД. Далее, для общности, малую полуось эллипса выражали через радиус кривизны эллипса на конце большой полуоси: $b = \sqrt{ra}$.

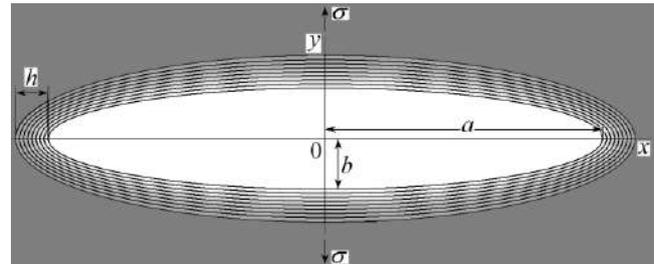


Рис. 1. Трещина в окружении пластически деформированного материала.

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

На рис. 2 приведена зависимость энергии образования трещины U от ее полудлины a для шести размеров ЗПД h , определяемых последовательностью $h_i = 0.2i$ mm ($i = 0 \dots 5$). Видно, что энергия U монотонно растет в процессе распространения трещины. Формирование ЗПД вокруг трещины требует дополнительной работы внешних приложенных сил.

Изменение потенциальной энергии пластины единичной толщины, связанное с распространением трещины на расстояние $dl = 2da$, равно

$$G = \frac{dU}{2da} = \frac{\pi\sigma^2}{4E} \left[4a + \sqrt{ra} + \frac{5h}{\beta + 2} \right]. \quad (3)$$

В механике разрушения G является энергетической характеристикой разрушения и называется «скоростью высвобождения упругой энергии» при распространении трещины [1]. Из уравнения (3) следует, что в общем случае пластическая деформация увеличивает трещиностойкость материала: чем больше зона пластической деформации h и меньше значение параметра β тем выше значение G . Анализ уравнения (2) позволил сформулировать общую закономерность: чем меньше градиент пластической деформации перед вершиной трещины, тем выше трещиностойкость материала.

При отсутствии ЗПД вокруг трещины из (3), получим следующее выражение для G :

$$G_{h=0} = \frac{\pi\sigma^2}{4E} [4a + \sqrt{ra}]. \quad (4)$$

Из него следует, что чем больше радиус кривизны трещины, тем трещиностойкость материала выше. Если $r \rightarrow 0$, то в пределе из уравнения (4) получим известное выражение для скорости высвобождения упругой энергии трещины Гриффитса [1, 2]: $G_{h=0} = \pi\sigma^2 a / E$.

Основной характеристикой трещиностойкости хрупких материалов с трещиной отрыва является функция $K_I = \sqrt{GE} = \sigma\sqrt{\pi a}$, которая в механике разрушения носит название коэффициента интенсивности напряжений (КИН). Подобную характеристику можно сформулировать и для пластичных материалов, подставив под корень выражение (3) для G :

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi \left[a + \sqrt{ra} / 4 + 5h / (4\beta + 8) \right]}. \quad (4)$$

Характеристика K_I является более универсальной по сравнению с G , поскольку не зависит от модуля Юнга материала. По определению, K_I является силовой характеристикой разрушения твердого тела.

Использование уравнений (2) и (3) позволяет анализировать критерии разрушения малоразмерных образцов пластичных материалов, когда размеры ЗПД соизмеримы с размером трещины.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление исследований П.23, и поддержана Российским Фондом Фундаментальных исследований, проект № 17-08-00377.

1. Anderson T.L. Fracture mechanics. Fundamentals and Applications. Third Edition. (2005) Taylor & Francis Group 6000 Broken Sound Parkway NW. <http://www.taylorandfrancis.com>
2. Broek D. Elementary engineering fracture mechanics (1974) Leiden.
3. Eshelby J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems // Proc. Roy. Soc. Lond. 241A (1957) 376-396.
4. Markenscoff X. Cracks as Limits of Eshelby Inclusions // Physical Mesomechanics 22 No 1 (2019) 42–45.

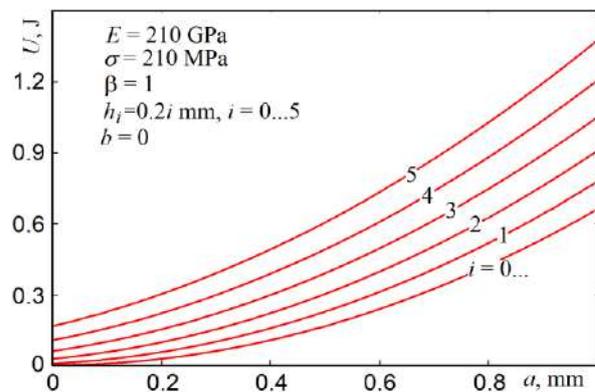


Рис. 2. Зависимость энергии образования U от длины трещины для разных значений h .

DOI: 10.17223/9785946218412/98

**ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ТЕМПЕРАТУРЫ И ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ
МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАВОДОРОЖЕННЫХ ОБРАЗЦАХ
НИКЕЛИДА ТИТАНА С НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ**

^{1,2}Батурин А.А., ¹Лотков А.И., ¹Гришков В.Н., ¹Родионов И.С.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский политехнический университет, Томск*

Свойства сплавов на основе TiNi очень чувствительны к составу сплава, термическим обработкам, влиянию примесей внедрения, в частности водорода. Водород оказывает негативное влияние на прочностные и сверхэластичные свойства сплавов на основе никелида титана. Кроме того, выявлено сильное влияние водорода на температуры и последовательность мартенситных превращений (МП). Обнаружено, что в сплавах с избытком никеля относительно эквиатомного состава, которые при комнатной температуре находятся в В2 фазе при наводороживании происходит уменьшение температуры начала МП В2→В19' на десятки градусов. Это связывается со стабилизацией В2 фазы водородом. Старение при комнатной температуре электролитически наводороженных образцов приводит к диффузионному перераспределению водорода от приповерхностного слоя с высокой концентрацией водорода в объём материала, что может привести к подавлению МП во всем объёме образцов и к значительному снижению прочностных и сверхэластичных свойств сплавов на основе TiNi [1,2]. Этот эффект необходимо учитывать при использовании сплавов на основе TiNi в медицине в качестве имплантатов.

Изделия из никелида титана подвергаются термическим обработкам. Однако в литературе отсутствуют данные о влиянии отжигов при повышенных температурах на свойства наводороженных сплавов на основе TiNi. Эти данные важны как для лучшего понимания влияния водорода на свойства данных сплавов, так и для практического их использования. В данной работе изучено влияние изохронных отжигов на термическую стабильность и температуры мартенситных превращений наводороженных образцов сплава Ti_{49,1}Ni_{50,9} (ат.%) с нанокристаллической структурой. Показано, что при температурах отжига выше 473К происходит термодесорбция водорода из образцов и формирование выделений, обогащенных атомами никеля. При этом температуры мартенситных превращений повышаются.

Работа поддержана Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23 и проектом РФФИ № 18-48-700040

1. A. Baturin, A. Lotkov, V. Grishkov, I. Rodionov and V. Kudiiarov, J. Alloy. Compd, 751, 359-363 (2018).
2. A. Baturin, A. Lotkov, V. Grishkov, I. Rodionov and D. Zhapova, J. Metast. Nano. Mater.31, 30-34 (2019).

DOI: 10.17223/9785946218412/99

**ВОДОРОД В НИКЕЛИДЕ ТИТАНА: ДИФФУЗИЯ, ВЛИЯНИЕ НА МАРТЕНСИТНЫЕ
ПРЕВРАЩЕНИЯ И НЕУПРУГИЕ СВОЙСТВА**

Лотков А.И., Батулин А.А., Гришков В.Н., Родионов И.С.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

На основе собственных результатов и литературных данных представлен обзор исследований влияния водорода на температуры, последовательность мартенситных превращений (МП) и неупругие свойства (эффекты сверхэластичности и памяти формы) сплавов на основе никелида титана.

Показано, что после электролитического наводороживания образцов при комнатной температуре атомы водорода сосредоточены в приповерхностном слое в основном в виде гидрида TiNiH. При старении предварительно наводороженных образцов при комнатной температуре атомы водорода перераспределяются от поверхности в объём материала. Скорость перераспределения атомов водорода зависит от их диффузионной подвижности. Показано, что эффективные коэффициенты диффузии атомов водорода при комнатной температуре в двойных сплавах на основе TiNi зависят от структурно-фазового состояния сплавов.

Установлено, что при наводороживании образцов в B2 фазе и последующем диффузионном перераспределении атомов водорода в этой же фазе по объёму образцов вследствие старения происходит значительное понижение температур МП $B2 \leftrightarrow B19'$ и $R \leftrightarrow B19'$. Влияние водорода на температуры МП $B2 \leftrightarrow R$ не происходит. При этом расширяется температурный интервал проявления предмартенситных изменений в микроструктуре сплавов. Дан анализ возможного механизма влияния водорода на термодинамическую стабильность B2 фазы по отношению к МП в B19' фазу на основе расчетов из первых принципов. Показано, что при наводороживании и распределении атомов водорода в мартенситной фазе B19' температуры МП не изменяются.

Методом термодесорбционной спектроскопии проведён анализ возможных мест локализации атомов водорода в образцах сплавов на основе TiNi. Представлены результаты исследований и их анализ по влиянию водорода на неупругие свойства сплавов на основе никелида титана.

Работа поддержана Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23 и проектом РФФИ № 18-48-700040

DOI: 10.17223/9785946218412/100

**AUTOWAVE AND ACOUSTIC CHARACTERISTICS OF LOW-CARBON STEEL 1008
AT LOADING**

Orlova D., Lunev A., Zuev L.

*Institute of Strength Physics and Materials Science,
Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russia
dvo@ispms.tsc.ru, agl@ispms.tsc.ru, lbz@ispms.tsc.ru*

Owing to the synergetic approach that describes the self-organization of highly nonequilibrium systems, a two-component model of localized plastic flow was proposed in the strength physics laboratory [1, 2]. This model is based on the connection of two subsystems of deformable solids: dynamic (responsible for plastic shaping) and informative (acoustic emission pulses). It was established that the specific distribution of deformation sites — the pattern of localized plastic flow — is spontaneously generated in materials at any stage of deformation. The type of such patterns is determined by the strain hardening law.

The key factor in the change of ultrasound velocity is that the elastic properties of the material become anisotropic in regions of local stress concentration due to structural defects (including dislocation pile-ups) [3]. At the present time, a comprehensive framework, which combines analysis of macro-scale localized plasticity patterns with measurements of ultrasound rate variation is only beginning to develop for real materials with complex structure. Thus, the goal of this paper is to investigate the dependence of surface wave velocity on plastic deformation behavior in low-carbon steel 1008, and to analyze the possibility of using the autowave model to formulate criteria for the structural strength of materials and elastic-plastic transition.

The investigation was performed on specimens of low-carbon steel 1008 (C – 0.05–0.11%; Mn – 0.35–0.65%; Si – 0.05–0.17%) cut from hot rolled steel in the form of dog-bone-shape with gage section dimensions 2×10×50 mm and annealed in vacuum at a temperature of 900 °C for 1 hour. The specimens were subjected to uniaxial loading at a constant rate of $6.67 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ at room temperature in the grips of a universal LFM-125 testing machine. Double exposure speckle photography [4, 5] was used to study in real time the stress-strain state of the specimens, and to visualize localized deformation and fracture zones. The acoustic informative parameter was the velocity of ultrasonic Rayleigh waves at a frequency of 5 MHz. The Rayleigh wave velocity was measured using a probe that consisted of a transmitting and receiving piezoelectric transducers.

A joint description of the evolution of localized plastic flow autowaves and ultrasonic Rayleigh waves was studied in deformed low-carbon steel 1008. Thus, specimen deformation affects both the ultrasound velocity increase and the evolution of autowave patterns. Changes in the kinetics of the both processes correspond to the critical points (kinks) on the material condition. The first kink corresponds to the elastic-plastic transition and the formation of switching autowave. The second kink and collapse of the localized deformation autowave correspond to material fracture. The kinetic characteristics of the autowave collapse at the prefracture stage can be established experimentally and may help to predict the time and place of fracture long before the appearance of its external signs. These features can be used in the development of metal forming technology and in diagnostic testing of parts and structures.

The work was carried out within the framework of the Program of Fundamental Scientific Research Russian State academies of sciences for 2013–2020, III.23.1.2.

1. L.B. Zuev, *Metallofiz.Noveishie Tekhnol.* **38**, 1335-1349 (2016).
2. L.B. Zuev, *Ann. Phys.* **16**, 286–310 (2007).
3. M. Kobayashi, *Int. J. Plasticity* **26**, 107-125 (2010).
4. L.B. Zuev, V.I. Danilov, *Philos. Mag.* **79**, 43-57 (1999).
5. R. Jones, C. Wykes, *Holographic and Speckle Interferometry* (Cambridge Univ. Press., Cambridge, 1983).

DOI: 10.17223/9785946218412/101

**РАЗВИТИЕ ОБРАТИМОЙ НЕУПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ДВОЙНОМ СПЛАВЕ НА
ОСНОВЕ TiNi ПРИ ИЗОТЕРМИЧЕСКОМ МЕХАНОЦИКЛИРОВАНИИ ИЗГИБОМ
ОБРАЗЦОВ В B2 ФАЗЕ**

Тимкин В.Н., Гришков В.Н., Лотков А.И., Жапова Д.Ю.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

При эксплуатации изделий из сплавов на основе никелида титана в качестве датчиков или исполнительных устройств (актюаторов) они могут подвергаться циклическому нагреву и охлаждению под нагрузкой, либо в свободном состоянии, а также многократно подвергаться нагружению и разгрузке в изотермических условиях. При этом структурно-фазовое состояние сплава многократно изменяется в ходе этих циклов, что приводит к фазовому наклепу и изменению функциональных свойств сплава, таких как эффект памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичность. Для стабильной работы изделий на основе TiNi необходимо, чтобы характеристики этих сплавов не изменялись в процессе эксплуатации.

Цель данной работы – исследовать закономерности накопления и возврата обратимой неупругой деформации в виде эффекта памяти формы и сверхэластичности в образцах двойного сплава Ti_{49,3}Ni_{50,7} (ат.%) в процессе их изотермического (295К) механоциклирования при деформировании образцов изгибом.

Образцы сплав Ti_{49,3}Ni_{50,7} (ат.%) в виде пластин (ширина 2 мм, толщина ~1 мм, длина 45 мм) испытывали изгибом в оснастке с V-образным каналом (угол между стенками канала 90°) при нагружении образцов цилиндрами заданного радиуса. Сплав имел крупнозернистую структуру (зёрна 20-30 мкм). Изотермические циклы «нагружение-разгрузка» проводили при температуре 295К.

Возврат деформации при разгрузке после нагружения до заданной деформации ϵ_t принимали равным величине эффекта сверхэластичности. При последующем нагреве разгруженных образцов определяли возврат деформации, связанный с реализацией ЭПФ, обусловленного обратным превращением деформационного мартенсита B19' в B2 фазу. Остаточная деформация после завершения формовосстановления образца при нагреве до 493К соответствует пластической деформации, развивающейся в процессе нагружения образцов до ϵ_t . Таким образом, в цикле «нагружение-разгрузка» с последующим нагревом разгруженных образцов выявляются все составляющие заданной при нагружении образцов деформации ϵ_t . При каждом значении ϵ_t (4.5% и 20.2%) проводили 11 механоциклов нагружения образцов изгибом и их разгрузки на отдельно взятых образцах. В сплаве при охлаждении и нагреве реализовывались мартенситные превращения (МП) B2 \leftrightarrow B19' ($M_s=252$ К, $M_f=223$ К, $A_s=258$ К, $A_f=273$ К). Таким образом, температура, при которой проводили испытания образцов (295К), находится выше A_f , то есть образцы имели структуру B2 фазы.

При деформации образцов изгибом на 4.5% с увеличением числа циклов «нагружение-разгрузка-нагрев» наблюдается плавное уменьшение величины суммарной неупругой деформации и плавное увеличение пластической деформации. Однако, даже после одиннадцатого механоцикла величина пластической деформации не превышает 1%. При этом величина ЭПФ не превышает 0.2% и слабо зависит от количества механоциклов. Зависимость величины эффекта сверхэластичности, от числа механоциклов практически полностью повторяет по форме зависимость суммарной неупругой деформации. Это указывает на то, что при деформации изгибом на 4.5% практически вся неупругая деформация в интервале от 1 до 11 механоциклов возвращается в режиме проявления эффекта сверхэластичности.

При деформации изгибом на 20.2% уже после первого механоцикла величина ЭПФ достигает 4.8% и приближается по величине к эффекту сверхэластичности равному 6.2%. При этом суммарная обратимая неупругая деформация достигает 11% и соответствует максимально возможному кристаллографическому ресурсу мартенситной деформации в сплаве Ti_{49,3}Ni_{50,7} (ат.%), который определяется деформацией кристаллической решётки B2 фазы при МТ B2 \rightarrow B19'. На втором цикле деформации происходит резкое уменьшение

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

величины ЭПФ. При этом величина эффекта сверхэластичности после второго механоцикла наоборот повышается. Однако дальнейшее увеличение количества механоциклов при $\epsilon_t=20.2\%$ приводит к снижению величины эффекта сверхэластичности и её слабой зависимости от числа механоциклов.

Обсуждаются физические факторы, обуславливающие наблюдаемые различия влияния механоциклирования при малых и больших заданных деформациях на проявление эффектов сверхэластичности и памяти формы.

Работа поддержана Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/102

**ВЛИЯНИЕ РКУП НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА
6063 ПРИ ИНДЕНТИРОВАНИИ И ЦАРАПАНИИ**

Филиппов А.В., Тарасов С.Ю.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Модификация структуры материала путем измельчения зерен методами интенсивной пластической деформации является перспективным направлением повышения эксплуатационных характеристик распространенных конструкционных материалов. В тоже время раскрыть полный потенциал материала с измельченной зеренной структурой можно только исследовав его характеристики на разных масштабных уровнях. Для определения деформационного поведения материала на микро уровне часто используются методы нано- и микроиндентирования и царапания.

Алюминиевый сплав 6063 является распространенным конструкционным материалом, который преимущественно применяется в авиационной технике и кораблестроении. Исследования структурообразования методом РКУП для данного сплава подробно рассмотрены. Ранее были выполнены трибологические исследования для АА6063 в УМЗ состоянии. Установлено различие в износостойкости и толщине слоя адгезионного переноса для крупнозернистых и УМЗ образцов. Ранее были выполнены исследования для нанокристаллической и УМЗ меди с применением наноиндентирования пирамидкой Берковича. Образование наплывов происходит в УМЗ образце с размером зерен около 300 нм, тогда как в нанокристаллическом образце наплывов не выявлено. Также наплывы на периферии отпечатков выявлены в образцах УМЗ алюминия и латуне. В тоже время исследований деформационного поведения на микроуровне для АА6063 в УМЗ состоянии ранее не проводилось.

Целью данной работы является исследование механических характеристик алюминиевого сплава 6063 с разной структурой при индентировании и царапании.

Для исследований использовались образцы алюминиевого сплава 6063 в отожженном состоянии и после РКУП. Для анализа влияния РКУП на микромеханические свойства материала использовалось индентирование четырехгранной пирамидкой Виккерса. Характер кривых нагрузка-перемещение при индентировании одинаков для всех образцов. Существенный прирост микротвердости обеспечивается после двух и восьми проходов РКУП. Между образцами после двух и четырёх проходов РКУП нет существенных различий.

Анализ 3D профиля поверхностей отпечатков позволил выявить характерные особенности деформационного рельефа, образовавшегося по краям отпечатка. Наблюдаемые возвышения принято называть наплывами. Величина наплыва резко увеличивается после двух проходов РКУП, по сравнению с отожженным образцом. После четырех и восьми проходов РКУП высота наплывов немного меньше.

При царапании крупнозернистых и УМЗ образцов также выявлены различия в величине силы трения и размерах впадин, образовавшихся после однопроходного царапания. Наименьшая сила царапания и глубина царапины получены при тестировании отожженного материала. Формирование УМЗ структуры методом РКУП приводит к существенному росту силы трения и глубины царапины уже после двух проходов. Наибольшая глубина царапины и сила трения выявлены при испытании образца после восьми проходов РКУП.

Анализ деформационного рельефа выполнен при рассмотрении 2D and 3D изображений поверхности царапин методом лазерной сканирующей микроскопии. Следов образования стружки не выявлено, равно как и трещин на поверхности царапин. В тоже время на графике изменения силы трения мы наблюдаем периодические «скачки» силы. Периодические сбросы нагрузки могут быть вызваны проскальзыванием шарика по поверхности алюминиевых образцов из-за динамического характера формирования и разрушения непрочных адгезионных связей. Эти факторы указывают на квазивязкий характер деформации образцов при царапании. Более высокая нагрузка при царапании УМЗ образцов связана с увеличением

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

глубины царапины. Чем больше глубина царапины, тем больше площадь контакта и больший объем материала вовлечен в деформационный процесс. Соответственно, для деформирования большего объема материала требуется приложить большее усилие.

На периферии царапин наблюдаются большие наплывы, что коррелирует с образованием наплывов при индентировании. С увеличением числа проходов РКУП на высота наплывов увеличивается. Наплывы у отожженного и четырех проходного образцов являются «рваными». Более равномерный деформационный рельеф сформировался при царапании четырех и восьми проходных образцов.

Проведены исследования деформационного поведения алюминиевого сплава 6063 в крупнозернистом и ультрамелкозернистом состоянии. Основным различием в деформации материала на микроуровне является образование больших по высоте наплывов у образцов в УМЗ состоянии по сравнению с крупнозернистым. Формирование УМЗ структуры приводит к повышению твердости материала. При царапании происходит более интенсивная деформация материала в УМЗ состоянии. При царапании происходит динамическое колебания нагрузки в направлении действия силы трения. Эти колебания обусловлены периодическим проскальзыванием шарика по поверхности алюминиевых образцов из-за динамического характера формирования и разрушения непрочных адгезионных связей.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.2.

DOI: 10.17223/9785946218412/103

**ФОРМИРОВАНИЕ ВАКУУМНО-ПЛАЗМЕННЫХ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНОВЫХ
СПЛАВАХ С УМЗ СТРУКТУРОЙ ДЛЯ ЗАЩИТЫ ОТ ВОДОРОДА**

¹Лотков А.И., ²Латушкина С.Д., ²Копылов В.И., ¹Батурин А.А., ¹Гришков В.Н.,
Родионов И.С., Тимкин В.Н.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Физико-технический институт НАН Беларуси, Минск*

Сплавы на основе титана являются перспективными для применения в качестве материалов для медицинских имплантатов. Однако при подготовке имплантатов к применению и при взаимодействии с физиологической средой организма они подвергаются воздействию водорода, что может приводить к водородной коррозии и водородной хрупкости. Уменьшить влияние водорода можно путем легирования титана и его сплавов малыми добавками палладия, формирования в них ультрамелкозернистой структуры методом интенсивной пластической деформации и создания защитных покрытий методами ионно-плазменных технологий.

Цель данной работы представить результаты исследований по формированию защитных покрытий на основе δ -(Ti, Zr)N с атомным соотношением $Zr/Ti > 1$ и $Zr/Ti < 1$ на сплавах VT1-0 и Ti-0.16Pd. Методами рассеяния рентгеновских лучей, энергодисперсионного микроанализа (ЭДА) и оптической спектроскопии высокочастотного тлеющего разряда (ОСВР) исследованы фазовый и элементный составы покрытий δ -(Ti, Zr)N на сплавах VT1-0 и Ti-0.16Pd с субмикроструктурной структурой. Методами рентгеноструктурного анализа и ОСВР изучено влияние электролитического наводороживания на фазовый состав покрытий и распределение водорода по глубине наводороженных образцов.

Результаты исследований показали, что покрытия на основе δ -(Ti, Zr)N с атомным соотношением $Zr/Ti > 1$ имеют повышенную адгезионную прочность по сравнению с покрытиями из нитрида титана и обладают барьерными свойствами для проникновения водорода при электролитическом наводороживании в физиологическом растворе. Показано, что указанные выше свойства могут быть повышены при нанесении покрытий с оптимальным соотношением атомов $Zr/Ti < 1$.

На основе результатов разработан научно-обоснованный подход к защите от негативного влияния водорода промышленных сплавов VT1-0 и Ti-0.16Pd с субмикроструктурной структурой, обладающих высокими пределами текучести и прочности по сравнению с их традиционными крупнозернистыми аналогами.

Работа поддержана проектом РФФИ № 18-58-00036 и Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/104

**EFFECT OF PRE-STRAIN ROLLING PATH ON ABNORMAL GRAIN GROWTH IN
FRICTION-STIR WELDED AL-MG-SI ALLOY**

¹Kalinenko A., ¹Vysotskiy I., ¹Malopheyev S., ¹Mironov S., ¹Kaibyshev R.
¹*Belgorod State University, Pobeda 85, Belgorod 308015, Russia*

The fine-grained microstructures evolved during friction stir welding of aluminum alloys often exhibit abnormal grain growth during post-weld heat treatment. To avoid this undesirable phenomenon, a pre-strain rolling approach has been employed in the present study. The proposed method was based on the idea that the pre-strain rolling would promote recrystallization instead of the abnormal grain growth during the subsequent heat treatment. To validate this concept, the produced welds were cold rolled in two different directions – either parallel or perpendicular to the weld path – prior to the standard T6 tempering.

In both cases, the pre-strain rolling was found to be effective for suppression of the abnormal grain growth. Moreover, the revealed effect was sensitive to the rolling path. Specifically, the pre-rolling along the weld line resulted in the finest final grain size in treated-treated welds. This observation was explained in the terms of relatively high Taylor factor as well as low orientation stability of the stir zone texture for this rolling path, which enhanced recrystallization behavior during subsequent annealing.

This study was financially supported by the Russian Science Foundation, grant No. 19-49-02001. The authors are grateful to the staff of the Joint Research Center, «Technology and Materials» Belgorod State National Research University for their assistance with the mechanical and structural characterizations.

DOI: 10.17223/9785946218412/105

**СТРУКТУРА И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ СПЛАВА Ti-6Al-4V, ИЗГОТОВЛЕННОГО
МЕТОДОМ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Савченко Н.Л.

*Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

Большинство представленных в литературе результатов по аддитивному получению изделий из титановых сплавов относится к построению детали лазером в защитной атмосфере в порошковом слое, либо путем локальной подачи порошка в зону выращивания. Как правило, металлические порошки имеют высокую удельную поверхность, что обуславливает неизбежное наличие пористости, а также перенос адсорбированных на поверхности порошинок загрязняющих веществ в объем готового изделия. Известно, что титан обладает высокой реакционной способностью к химическим элементам, содержащимся в атмосферном воздухе – кислороду и азоту, а также к углероду. Попадание данных элементов в титановые сплавы приводит к их сильному охрупчиванию. Самым эффективным средством для предотвращения попадания загрязняющих элементов в титановые сплавы в процессе аддитивного производства является проведение технологического процесса в вакууме. Однако, даже перенос процесса изготовления изделия в вакуум не позволяет избавиться от пористости, а также от наличия оксидов и других загрязняющих элементов, которые в той или иной степени всегда присутствуют на поверхности исходного порошка. Перспективной альтернативной технологией, лишенной описанных выше недостатков использования порошков в качестве исходного сырья, является послойное выращивание изделий электронным пучком в вакууме с использованием проволочного филамента. Технологии, применяющие проволоку, в отличие от порошка, также обеспечивают более высокий уровень стабильности и повторяемости процесса выращивания, а также более высокую производительность.

Целью работы является изучение структуры и фазового состава образцов из сплава Ti-6Al-4V, полученных с использованием электронно-лучевой проволочной аддитивной технологии.

Образцы были получены с использованием экспериментальной установки для выращивания изделий из проволоки в вакууме, в качестве источника нагрева с последующим плавлением использовался электронный пучок. В качестве исходного материала использована проволока из титанового сплава Ti-6Al-4V диаметром 0,8 мм.

На основании данных оптической, сканирующей электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа показано, что полученные после послойного выращивания образцы Ti-6Al-4V имеют гетерогенную микроструктуру, которая включает в себя помимо формирующихся в процессе эпитаксиального роста столбчатых предшествовавших β -зерен с средним размером не выше 1,5 мкм, систему ортогональных пластин мартенситной α' -фазы. При этом по направлению в вершине построенного образца уменьшается толщина пластин α' -фазы и количество остаточной β -фазы (от 4 мкм и 10 об.% для нижнего слоя, до 2 мкм и 5 об.% для верхнего).

*Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований
государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.*

DOI: 10.17223/9785946218412/106

**МОДИФИКАЦИЯ СТОЛБЧАТОЙ СТРУКТУРЫ СПЛАВА Ti-6Al-4V ПРИ
АДДИТИВНОЙ ПРОВОЛОЧНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Савченко Н.Л.

*Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

Аддитивные технологии, в которых в качестве основного расходного материала используется проволока, обладают высокой производительностью, однако существуют некоторые трудности, которые ограничивают их широкое применение для титановых сплавов. Значительный подвод тепла и большой градиент температуры во время процесса выращивания Ti-6Al-4V приводят к образованию длинных столбчатых зерен β -фазы, ориентированных вдоль направления выращивания, перпендикулярно подложке. Формирование крупных столбчатых зерен β -фазы является решающим фактором, определяющим анизотропию механических свойств всего изделия из титанового сплава. Такая структура материала недопустима для изделий, в которых требуется изотропия механических свойств. Известно, что двумя основными факторами, которые влияют на тенденцию роста зерна в процессе аддитивного производства, являются температурный градиент и скорость затвердевания. Высокий температурный градиент и низкая скорость затвердевания имеют тенденцию приводить к появлению столбчатых зерен, однако низкий температурный градиент и высокая скорость затвердевания приводят к росту относительно равноосных зерен. К настоящему времени проведено несколько исследований, в которых предпринимались попытки уменьшить размер столбчатых зерен в титановом сплаве, полученном аддитивной технологией. Ti-6Al-4V с мелким размером β -зерна получают с помощью прокатки роликом под высоким давлением каждого выращенного слоя непосредственно после его нанесения. В других работах для уменьшения размер зерен β -фазы увеличивали скорость охлаждения образца в процессе выращивания. Существует подход уменьшить столбчатые β -зерна путем добавления частиц бора в ванну расплава. Не все вышеописанные приемы уменьшения столбчатых зерен применимы в случае электронно-лучевой проволочной аддитивной технологии, поскольку процесс выращивания изделия происходит в вакуумной камере. Однако эта технология обладает большим потенциалом с точки зрения получения материалов с уникальной структурой и высокими механическими свойствами.

Целью настоящей работы являлось исследование структуры и фазового состава сплава Ti-6Al-4V, полученного с использованием электронно-лучевой проволочной аддитивной технологии и выращенного на комбинированной подложке из титанового сплава VT1-0 и нержавеющей стали 12X18H10. Сущность подхода заключается в нахождении параметров получения, при которых будет формироваться диффузионное соединение между пластинами титанового сплава и нержавеющей стали, которое изменит режим охлаждения выращиваемого сплава Ti-6Al-4V и модифицирует столбчатую структуру зерен β -фазы.

С использованием электронно-лучевой проволочной аддитивной технологии по двум режимам, отличающимся величиной тока электронного пучка, получены образцы из сплава Ti-6Al-4V. Процесс выращивания происходил с использованием комбинированной подложки из титанового сплава VT1-0 и нержавеющей стали 12X18H10. Показано, что для режима с большим значением тока пучка было характерно образование столбчатых зерен β -фазы с меньшей высотой и шириной по сравнению с режимом с низким током. Данный эффект обсуждается в терминах выравнивания температурного градиента и увеличения скорости охлаждения в процессе выращивания, из-за образования диффузионного соединения между пластинами из титанового сплава и нержавеющей стали, содержащего интерметаллиды Fe₂Ti, FeTi и Cr₂Ti.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/107

**ТРИБОЛОГИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА
ЦИРКОНИЯ ПРИ СУХОМ СКОЛЬЖЕНИИ ПО СТАЛИ**

Савченко Н.Л.

*Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

Из имеющихся на сегодняшний день данных следует, что керамика на основе поликристаллического частично стабилизированного оксидом иттрия тетрагонального диоксида циркония (Y-TZP), благодаря своим выдающимся механическим свойствам, наиболее многообещающий конструкционный материал как среди класса трансформационно-упрочненных керамик, так и среди керамических материалов в целом.

Как следует из представленных в литературе данных, обычно испытания при трении в паре Y-TZP/керамика заканчиваются уже при скоростях выше 1 м/с, вследствие катастрофического разрушения поверхности трения. По мнению ряда исследователей, причиной этого эффекта называется прекращение действия механизма повышения вязкости разрушения за счет превращения из тетрагональной в моноклинную фазу по мере роста температуры поверхности керамики и приближения её к области стабильности тетрагональной фазы (около 900 °С). Другой причиной быстрого износа при повышенных скоростях и, соответственно повышенных температурах в зоне трибоконтакта, является низкая теплопроводность диоксида циркония и, возникающие вследствие этого термические напряжения. Чтобы выяснить причину падения износостойкости керамики на основе диоксида циркония с повышением скорости скольжения, необходимы эксперименты с керамическими материалами, отличающимися значениями теплопроводности, либо с сильно различающимися вкладками механизма трансформационного упрочнения в свойства керамики на основе диоксида циркония.

В настоящей работе показано, что для керамики на основе диоксида циркония с различными механизмами увеличения вязкости, а именно: трансформационно-упрочнённой керамики Y-TZP и Y-TZP-Al₂O₃, субмикронной керамики Y-TZP-Al₂O₃ без превращения и керамики ZrO₂-MgO с повышенной вязкостью за счет эффекта микрорастрескивания, существует универсальная зависимость интенсивности изнашивания от скорости с максимумом при средних скоростях скольжения ($\approx 2-3$ м/с) по стали, в которой прослеживается влияние двух факторов – повышение уровня термомеханических напряжений с ростом температуры в зоне трибоконтакта и процесс формирования сплошного слоя переноса за счет перехода его в квазижидкое состояние при температурах в зоне трибоконтакта выше температуры плавления стали, приводящего к снижению уровня контактных напряжений.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/108

**СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ТРЕНИЯ КЕРАМИКИ ZrO_2 - Y_2O_3
ПОСЛЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО СКОЛЬЖЕНИЯ ПО СТАЛИ**

Савченко Н.Л.

*Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

Анализ литературных данных показывает, что до сих пор фактически нет сведений о структурных изменениях в поверхностных слоях керамических композитов после режимов высокоскоростного трения. Получение таких экспериментальных данных является важным с точки зрения изучения связи поверхности и внутренних объемов и, следовательно, механизма поведения материала в целом.

В настоящей работе изучены структурные особенности поверхности трения частичностабилизированной оксидом иттрия диоксидциркониевой керамики после высокоскоростного скольжения по стали.

Образцы керамики ZrO_2 -3 мол.% Y_2O_3 были испытаны на трение скольжения по стальному диску при скоростях скольжения от 2 до 47 м/с.

Металлографическими и рентгенографическими исследованиями приповерхностных областей исследуемых керамических материалов были выявлены две дифференцированных по структуре области: (1) тонкий слой с дисперсной структурой на поверхности трения керамики толщиной 1...2 мкм и под ним (2) область материала с формоизмененными (вытянутыми в направлении скольжения) относительно исходного состояния зернами.

Методом атомно-силовой микроскопии было показано, что структура поверхностных тонких слоев керамики в первой области состоит из наночастиц размером 50...60 нм.

По данным метода скользящего рентгеновского пучка в зоне №2 наблюдается непрерывное увеличение отношения интенсивностей пиков (004) и (400) тетрагональной фазы с ростом глубины анализируемой области до 14 мкм. Для мелкокристаллического слоя толщиной 1...2 мкм, на поверхности трения характерно отсутствие рентгенографической текстуры, поскольку соотношение в дуплете пиков тетрагональной фазы было такое же, как и в исходном состоянии до трения. Последний факт можно объяснить процессами перемешивания в верхних слоях керамики. Кроме этого в поверхностном тонком слое наблюдалось повышенное содержание кубической фазы диоксида циркония и были обнаружены рентгеновские пики, соответствующие γ - Fe_2O_3 .

На основании полученных экспериментальных данных было сделано заключение, что при высокоскоростном трении керамики на основе Y-TZP в диапазоне скоростей скольжения от 10 до 47 м/с, в её поверхностных слоях идут одновременно два процесса: образование собственно тонкого поверхностного слоя и формирование структуры подповерхностного текстурированного слоя за счет эффекта ферроупругости, который служит упрочнённой подложкой. Тонкий поверхностный слой в момент трения находится в квазиджидком состоянии и содержит наночастицы γ - Fe_2O_3 , а также тетрагональной и кубической фазы ZrO_2 .

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/109

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ И СТРУКТУРУ КОБАЛЬТОВЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВАКУУМНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ТЕХНОЛОГИИ

¹Гальченко Н.К., ^{1,2}Колесникова К.А., ¹Раскошный С.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский политехнический университет, Томск*

В последние годы активно рассматриваются методы создания металлических инертных анодов с защитными покрытиями из металла, кермета, керамики и оксидов, обеспечивающими высокую электропроводность всего анода. Из литературы следует, что этим требованиям могут удовлетворять кобальтовые покрытия с сформированными на их поверхности оксидами.

Одним из эффективных способов формирования покрытий на металлических анодах является комбинация шликерного метода нанесения ультрадисперсных порошков кобальта с последующим электронно-лучевым оплавлением и формированием на их поверхности оксидных пленок диффузионным или окислительным отжигом. Выбор компонентов покрытия, материала металлической основы, а также технологических приемов электронно-лучевого оплавления основан на минимизации концентрации металла основы на поверхности покрытия и необходимости получения в поверхностных слоях не менее 90 мас.% Со. Достижение результата может быть реализовано, в том числе, за счет легирования твердого раствора сформированного покрытия тугоплавкими легирующими элементами, повышающими прочность межатомных связей в кристаллической решетке.

Целью настоящей работы является исследование возможности применения электронно-лучевой технологии для создания металлических анодов с покрытиями системы Со - X (где X - W, Mo, Ta) с достижением в приповерхностных слоях концентрации кобальта не менее 90 мас.%, отвечающими технологическим требованиям.

Легирующие элементы наносили в виде порошковых (шликерных) обмазок на подложки из Ст.3, 12Х18Н10. Технология нанесения шликера состояла в приготовлении суспензии из высокодисперсных порошковых материалов на основе спиртового раствора, которая наносилась на металлическую основу обмазкой толщиной слоя не более 1 мм. Толщина покрытия регулировалась количеством слоев последовательно нанесенной суспензии на предыдущий оплавленный слой с финишным оплавлением электронным лучом. Ускоряющее напряжение (U), диаметр и длина развертки электронного луч (L), а также скорость перемещения подложки (V) составляли: 28 кВ/мм, 1 мм, 12 мм и 3 мм/с соответственно; плотность мощности в луче (q) - 10^4 - 10^5 Вт/см².

Предварительно проведенные исследования по влиянию состава стальных подложек на структуру и химический состав кобальтовых покрытий не показали значительной разницы в полученных результатах. Кристаллизация однослойных покрытий происходила с формированием однородной структуры с диаметром зерен 12-20 мкм. Трехслойные покрытия, благодаря их локализованному подогреву во время последовательного наложения оплавленных слоев, имели характерную микроструктуру, состоящую из вытянутых в направлении градиента температур зерен, достигающих в поперечном сечении размера 25 мкм, со среднестатистическим отношением L/d около 3 (рис.1,б). В большинстве структур на границе раздела и в зонах перекрытия оплавленных дорожек выявлены трещины.

Эксперимент показал, что увеличением количества слоев кобальтовых обмазок на металлических подложках можно лишь в определенных пределах добиться снижения доли участия железа в формировании поверхностных структур. Так, в трехслойном покрытии, по сравнению с однослойным, получено почти двукратное повышение концентрации кобальта в поверхностном слое (с 25 до 45 мас.%), но содержание железа снизилось незначительно – с 50 до 42 мас.%. В связи с этим в работе были исследованы два приема, часто применяемые в упрочняющих технологиях. Первый из них основывался на дополнительном введении в состав

Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения в материалах с иерархической структурой

кобальтового шликера тугоплавких легирующих элементов W, Mo, Ta, способных накладывать дополнительные связи на диффундирующие элементы. Вторым приемом заключался в создании из этих элементов барьерных слоев, которые в виде самостоятельных шликерных обмазок помещались в плоскость раздела «подложка – Со-покрытие» с промежуточным оплавлением электронным лучом.

Эксперимент показал, что структуры покрытий с 5 мас.% W и Mo характеризуются наличием аксиальных текстур и различаются только размерами зерен твердого раствора и их ориентацией относительно металлической основы. Установлено, что повышение концентраций W и Mo до 10 мас.% привело к благоприятному изменению морфологии зерен до сферической и снижению в 3-5 раз размера зеренной структуры. Было отмечено, что Ta, по сравнению с Mo и W, наиболее эффективно измельчает структуру Со-покрытий до среднего размера зерна 6 – 12 мкм уже на стадии легирования 5 мас.%. Общим для всех составов, содержащих Mo, W и Ta, является формирование плотных структур покрытий без внутренних и поверхностных дефектов. Тем не менее, добиться повышения содержания кобальта в покрытиях свыше 60 мас.% введением в их составы тугоплавких легирующих элементов не удалось.

При проведении дальнейших исследований была показана эффективность использования молибдена и вольфрама в качестве барьерных слоев, расположенных в плоскости раздела «подложка – Со-покрытие», которые во время электронно-лучевого оплавления Со - обмазок способствовали снижению интенсивности массопереноса железа из металлических подложек в покрытия и получению в них максимальной концентрации кобальта - 86 -90 мас.%.

Секция 3. Проблемы компьютерного
конструирования материалов
с иерархической структурой

DOI: 10.17223/9785946218412/110

**О КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО ИЗНОСА
ОГНЕУПОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Заболотский А.В., Турчин М.Ю., Хадыев В.Т., Мигашкин А.О.

ООО «Группа «Магнезит», Сатка

Огнеупорные материалы или огнеупоры представляют собой гетерогенные системы состоящие из значительного числа компонентов, различающихся как фазовым, так и зерновым составом. В типичном случае шихта для изготовления огнеупорного кирпича может содержать до 10 компонентов, при этом массовая или объемная доля каждого составляет от десятых долей до десятков процентов. Кроме того, вследствие фазовой разнородности исходных материалов, готовые огнеупоры обладают существенной пористостью, составляющей от 3 до 20 % по объему (исключение составляют теплоизоляционные материалы, для которых пористость целенаправленно повышается в процессе изготовления и может составлять более 80%).

С точки зрения структуры в типичных огнеупорах могут быть выделены каркас, состоящий из крупных и средних зерен и связующее, включающее тонкую фракцию и непосредственно связку, которая упрочняется после придания изделию формы за счет физико-химического превращения, как правило происходящего в процессе термообработки изделия. Температура термообработки огнеупорных изделий зависит от вида связки и составляет не менее 300 °С (гидравлические и органические связки), а для отдельных групп изделий может достигать 2000 °С (керамические связки). Поры в огнеупорных материалах как правило находятся в связующем, за исключением случаев, когда для формирования каркаса используются зерна материалов, обладающие собственной значительной пористостью.

В процессе эксплуатации (службы) огнеупорные материалы подвергаются сложному воздействию включающему: механическую составляющую, вследствие давления соседних элементов конструкции, термомеханическую составляющую за счет собственного термического расширения материалов, а также химическое и абразивное воздействие обрабатываемой среды (в типичном случае расплава металла).

В процессе проектирования конструкций с использованием огнеупоров часто встает вопрос оценки ресурса материала, либо анализа ранее имевшего место разрушения футеровки. Как правило, за исключением явных аварийных ситуаций, разрушение таких материалов происходит по механизму малоциклового усталости. При этом разрушающие трещины в большинстве случаев продвигаются по связке огнеупорного материала, обходя более крупные зерна каркаса. Для моделирования положения и роста трещин нами использовались известные методы конечных элементов и клеточных автоматов.

В рамках решения практических задач были выработаны подходы для количественной оценки исходной поровой структуры материалов исходя из фазового и зернового состава сырьевых компонентов шихты (включая расчет формы микродефектов и средних расстояний между ними), выявления мест возникновения иницирующей трещины, включая мезомоделирование процесса объединения соседних микротрещин, в том числе определение коэффициентов интенсивности напряжений для объемных систем дефектов материала. На основе полученных результатов были выработаны прогнозы ресурса огнеупорных футеровок, которые с удовлетворительной точностью предсказали место и момент времени появления визуально наблюдаемых трещин при типичных условиях эксплуатации оборудования.

Кроме того, результаты структурного моделирования материалов были использованы для определения безопасных режимов удаления влаги из гидравлически твердеющих огнеупорных материалов (бетонов), подверженных взрывному разрушению в случае резкого подъема температуры или применении неоптимального режима термообработки. При этом были выработаны рекомендации для термообработки нескольких материалов различной плотности, полученных с применением связующего различной химической природы. В рамках проведенного исследования были разработаны методики для лабораторной аттестации

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

таких материалов (определения параметров, необходимых для моделирования удаления влаги через существующие поровые структуры).

В настоящее время решается проблема прогнозирования ресурса службы материалов в различных условиях по результатам стандартных лабораторных испытаний огнеупоров и разработка удобной математической модели термомеханического износа огнеупоров в процессе службы.

1. Заболотский А.В., Аксельрод Л.М., Марченко Д.А. Моделирование процесса перемещения влаги в огнеупорном бетоне при сушке с помощью перколяционных структур // Новые огнеупоры. 2018. № 8. с. 28 – 35
2. Заболотский А.В. Аксельрод Л.М. Моделирование разрушения крупных бетонных блоков при сушке под воздействием термической нагрузки. //XV Минский Международный форум по тепло и массообмену. Минск 2016. Т. 3. С. 133-137.
3. Заболотский А.В., Аксельрод Л.М., Дониц Р.А., Поспелова Е.И., Марченко Д.А. Математическое моделирование движения влаги в огнеупорных бетонах и торкрет-массах во время сушки. // Новые огнеупоры 2016. № 12. с. 6-12.
4. Заболотский А.В. Построение и исследование модели поровой структуры керамического материала. // Инновационная наука. № 03-1/2017. с. 27 - 34.
5. Заболотский А.В. Моделирование структуры связки керамического материала как перколяционного кластера второго порядка. // Сборник статей международной научно-практической конференции "Совершенствование методологии познания в целях развития науки" в 3 ч./ Ч.3 - Уфа. Аэтерна. 2017. с. 67 - 76.
6. Zabolotskii, A.V., Aksel'rod, L.M., Donich, R.A. et al. Mathematical Modeling of the Movement of Moisture in Refractory Concrete and Gunning Bodies during Drying.// Refract Ind Ceram. 2017. V. 57 pp 578–584
7. Zabolotsky A.V., Axelrod L.M. Application of the Cell Automata Method to the Brittle Material Thermal Fatigue Fracture Simulation. // Journal of Scientific and Engineering Research. 2017. V.4 №10 pp. 284-292
8. Zabolotsky A.V. Percolation theory usage for water transfer simulation while drying out of refractory castables.// Int. J of Materials. 2017. v. 4. p 46 - 53.

DOI: 10.17223/9785946218412/111

COMPUTER SIMULATION OF QUANTUM TECHNOLOGIES: A₂ (A = C, Si, N, P, O, S)
DIMMER SENSORS BASED ON SINGLE-WALL CARBON NANOTUBES

¹Maslova O.A., ¹Beznosyuk S.A., ²Masalimov A.S.

¹Altai state university, Barnaul

²Karaganda state university, Karaganda

The accelerating second quantum revolution of technologies assumes the use of specific non-local quantum entangled systems of subatomic attosecond and supraatomic femtosecond scale levels of materials [1]. The use of single-wall carbon nanotubes (SWCNTs) is now considered to develop highly sensitive femtosecond specific quantum sensors at supraatomic nanosized scale [2]. Today it is known that SWCNTs are very sensitive to molecules such as NH₃, NO₂, C₂H₄, CO, SO₂, H₂S, H₂, N₂, O₂, [3, 4].

In this regard, the theoretical study of the femtochemistry quantum processes different atoms on nano-sized surfaces of SWCNTs is very relevant. It is carried out within the framework of this work using quantum chemical methods of computer simulation. The purpose of this work is to study the adsorption of diatomic A₂ molecules (A = C, Si, N, P, O, S) by a SWCNT having a minimum length and diameter. The choice of molecules is determined by the need to compare the adsorption characteristics of dimers belonging to group IV (C, Si), group V (N, P) and group VI (O, S) of the second and third periods of the table of chemical elements. This paper presents the theoretical study of quantum-chemical solution of one of the most urgent tasks in the development of a new generation of supra-atomic femtosecond sensors of molecules on the basis of SWCNTs.

Fig. 1 shows the attack by the diatomic A₂ molecule of the sensor outer surface (left). Here h is the distance from the SWCNT outer surface to the dimer atom nearest to it. On the Fig. 2 there are three points (T, B, C) of the diatomic A₂ molecule landing on the SWCNT outer surface.

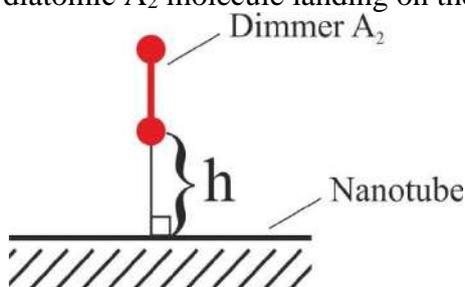


Fig 1. Model of the diatomic A₂ molecule adsorption on the SWCNT outer surface

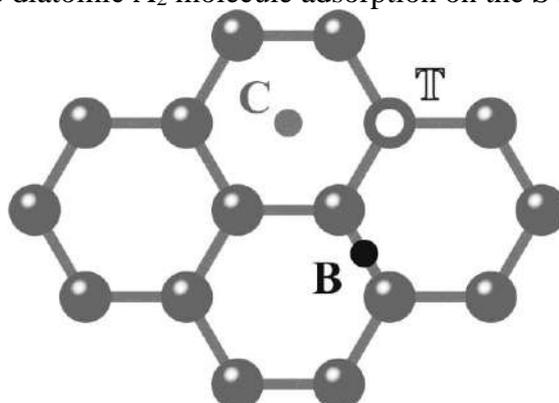


Fig 2. Three points (T, B, C) of the diatomic A₂ molecule landing on the SWCNT outer surface.

Numerical simulation is performed using the approach that was considered in a previous paper [5]. Modeling and calculations are performed in two stages. At the first stage, a study is made of the stable configuration of the SWCNT having the minimum diameter and the minimum length. At the second stage, simulations of attacks with different orientation of the A₂ (A = C, Si, N, P, O, S) molecules of different landing sites on outer surface of the sensors are performed. The Kohn-Shem method is used in the local density functional approximation LDA / 3-21G (ORCA package [6]) to model the potential energy surface (PES) of the sensor nanosystems.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

A study of femtosecond sensors of the supra-atomic range of the nanoscale based on the SWNTs sensor has shown the possibility of an adequate description of such sensory nanosystems in a multilevel hierarchy of functional elements of intelligent materials using modern density functional methods.

From the obtained results it follows that the axes of all molecules are perpendicular to the outer surface of the sensor, as shown in Fig. 1. We considered three positions of landing of the molecules presented in fig. 2: above the carbon atom, above a pair of carbon atoms and the center of the sextet of carbon atoms. According to the results of calculations, we note significant differences in the adsorption characteristics of diatomic molecules of groups IV (C, Si), V (N, P) and VI (O, S) of the second and third periods. In case of C_2 , Si_2 molecules, it is chemisorption. In turn, for the O_2 , S_2 , and N_2 , P_2 molecules, it is a variant of physical adsorption. In a case of C_2 molecule, it is more preferable to adsorb on a pair of C-C atoms, and for the Si_2 molecule it is energetically advantageous to attach one carbon atom C. For molecules O_2 , S_2 , N_2 , P_2 it is preferable to attach in the center of the carbon sextet C_6 .

By analyzing the PES of quantum nanomolecular sensor systems, the following conclusions were obtained:

- The results of the quantum chemical calculations performed are in agreement with the published data of other authors for the SWCNT sensors in cases of molecules O_2 and N_2 .

- Linking all investigated dimmers with an axial orientation perpendicular to the outer surface of the SWCNT sensor is an energetically beneficial exothermic process.

- The SWCNT sensor binds C_2 , Si_2 molecules with energies of 2.91 eV and 1.51 eV, respectively. This is chemisorption.

- The most stable is the position of the C_2 molecule at an equilibrium distance of 1.39 Å from the outer surface of the SWCNT sensor between a pair of adjacent carbon atoms C - C, and in the case of Si_2 – at an equilibrium distance of 2.13 Å above the carbon atom in the SWCNT sensor.

- For the O_2 , S_2 , N_2 , P_2 molecules, the energies of attachment to a single-walled CNT are: 0.39 eV, 0.52 eV, 0.15 eV, and 0.27 eV, respectively. This is an order of magnitude less than for the adsorption of C_2 and Si_2 molecules.

- The most stable arrangement of O_2 , S_2 , N_2 , P_2 molecules occurs in the center of the carbon sextet C_6 of the SWCNT sensor at distances: 2.66 Å, 2.96 Å, 3.00 Å and 3.17 Å respectively. Low binding energies and positioning indicate a physical type of adsorption.

The data obtained may be useful in further studying the growth process and the formation of the infrastructure of femtosecond sensors at the supra-atomic level of carbon nanomaterials in order to change and improve their original properties, as well as in studying the adsorption of diatomic molecules by carbon nanotubes, in the development of gas sensors based on the SWCNT.

1. Beznosyuk S.A. and Zhukovsky M.S. Multiscale space-time dissipative structures in materials: two-electron genesis of nonequilibrium electromechanical interfaces // *Phys. Mesomechanics*. 2017.- Vol. 20(1). P. 102–110.

2. Steinhäuser M.O. Computational Multiscale Modeling of Fluids and Solids: Theory and Applications, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2017. - 419 p.

3. Lan Y., Wang Y., Ren F. Physics and applications of aligned carbon nanotube // *Advances in Physics*. 2011 - №4. P. 553-678.

4. Fahimen S. N_2 adsorption on the inside and outside the single-walled carbon nanotubes by density functional theory study// *J. Phys.* 2018. - №4. P. 2–15.

5. Beznosyuk S.A., Maslova O.A., Zhukovsky M.S., et al. Mathematical modeling of the infrastructure of attosecond actuators and femtosecond sensors of nonequilibrium physical media in smart materials // *AIP Conf. Proc.* 2017. - №1909. P. 020014-1 – 020014-5.

6. Neese F The ORCA program system. *Wiley interdisciplinary Reviews //Comput. Mol. Sci.*, 2012, Vol 2., Issue 1, P. 73–78.

DOI: 10.17223/9785946218412/112

**НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ КОСТИ СРЕДНЕЙ
ФАЛАНГИ ПАЛЬЦА РУКИ**

^{1,2}Чайковская Т. В., ^{1,2}Кульков С.Н.

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Представители профессий, связанных с мелкой моторикой и работой с клавиатурой, а также музыканты, ювелиры наиболее сильно подвержены дегенеративным изменениям хрящевой ткани суставов. На поздних стадиях развития болезни основным методом лечения является эндортозирование суставов.

Существующие эндопротезы по замене сустава пальца устанавливаются непосредственно в саму кость фаланг. Вживляемый имплантат должен обладать не только биологической и химической совместимостью с организмом, но и механической совместимостью. Неверный выбор конструкции и материала протеза может привести к повторным операциям, вследствие расшатывания протеза из-за деградации примыкающей костной ткани.

Для разработки и подбора индивидуальных механически совместимых с костной тканью протезов необходимо исследовать механическое поведение костей пальцев при физиологических нагрузках, которое зависит от структуры и состава костных тканей. Использование методов компьютерного моделирования позволит глубже изучить механику взаимодействия суставов и костей пальцев, а также сформулировать рекомендации по подбору индивидуального, механически совместимого протеза.

В работе представлена модель кости средней фаланги пальца руки, учитывающая наличие компактной и губчатой костных тканей, проведены расчеты и исследовано напряженно-деформированное состояние при изменении плотности и массовой доли минералов губчатой костной ткани.

Расчеты проводились в программном комплексе ANSYS. Плотность губчатой костной ткани варьировалась от 0.5 до 1 г/см³, массовая доля минералов от 0.3 до 0.4.

DOI: 10.17223/9785946218412/113

УСТОЙЧИВОСТЬ ТЕРМОБАРЬЕРНОГО ПОКРЫТИЯ ПРИ ИНТЕНСИВНОМ ТЕПЛОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

¹Люкшин П.А., ^{1,2}Панин С.В., ^{3,1}Люкшин Б.А., ¹Матолыгина Н.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский политехнический университет, Томск*

³*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск*

Для деталей конструкций, работающих в условиях высоких термосиловых нагрузок, используются различного рода защитные покрытия, получившие название термобарьерных. Одна из проблем возникает в силу того, что теплофизические свойства материалов покрытия и подложки, т.е. самой детали, как правило, заметно различаются. Кроме того, при интенсивном тепловом воздействии распределение температуры как в переходном режиме, так и в стационарном, может быть существенно различным по объему детали и покрытия.

При моделировании термобарьерного покрытия (ТБП) при интенсивном тепловом воздействии последовательно решается ряд задач: теплопроводности, термоупругости, устойчивости, напряженно-деформированного состояния покрытия и подложки после потери устойчивости покрытия.

При решении задач теплопроводности и термоупругости система «покрытие – подложка» моделируется структурно-неоднородным телом с учетом «подслоя», возникающего между покрытием и подложкой под действием термомеханических воздействий.

Под действием температуры, найденной в результате решения задачи теплопроводности, в системе «подложка – покрытие» возникают деформации и напряжения за счет разности коэффициентов линейного температурного расширения в структурно-неоднородном теле и неравномерного распределения температуры в нем.

При решении задачи устойчивости термобарьерное покрытие моделируется пластинкой, подкрепленной ребрами жесткости. Пластинка находится на подложке, которая рассматривается как упругое винклеровское основание. Геометрия рельефа на контакте термобарьерного покрытия и подложки отражается наличием в покрытии своего рода ребер жесткости, подкрепляющих покрытие. Рассматриваются варианты, когда эти ребра имеют прямоугольное или треугольное сечение. Рельеф контактной границы незначительно влияет на распределение температуры в системе «покрытие–подложка».

Решение задачи устойчивости в соответствии с концепцией Эйлера определяет форму потери устойчивости, в частности, число волн (или полуволн) в зависимости от размеров пластины в плане и ее толщины. Что касается величин прогибов, они находятся из условия, что тепловое расширение определяет размеры пластины в плане после ее нагрева, и эти размеры отвечают суммарной длине срединной поверхности пластины в каждом из направлений после потери устойчивости.

Найденные величины прогибов позволяют ставить и решать задачу о параметрах смещений, деформаций и напряжений как в покрытии, так и в подложке, если иметь в виду, что прогибы определяют условия на контакте покрытия и подложки.

При решении задачи устойчивости термобарьерного покрытия сложный рельеф контактной границы «покрытие-подложка» увеличивает критические напряжения потери устойчивости покрытия и изменяет форму потери устойчивости.

Показано, что при решении задачи о напряженно-деформированном состоянии под действием интенсивного теплового воздействия влияние граничных условий на напряжения велико, влияние рельефа границы раздела на величину докритических напряжений незначительно.

Полученные результаты позволяют сформулировать требования к уровню адгезии термобарьерного покрытия к подложке, обеспечивающей его работоспособность.

Работа выполнена в рамках ПФНИ ГАН на 2013-2020 годы по направлению фундаментальных исследований III.23 проект III.23.1.3.

DOI: 10.17223/9785946218412/114

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ
МЕЖПОЗВОНОЧНОГО ДИСКА НА ЕГО НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ
СОСТОЯНИЕ**

¹Рикун Ю.А., ^{1,2}Чайковская Т. В., ^{1,2}Кульков С.Н.

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Позвоночник является одной из важнейших конструкций человеческого организма. Основной причиной появления сильных болей в спине и шее у людей среднего и пожилого возраста является деградация межпозвоночного диска. Радикальным методом лечения в этих случаях является замена межпозвоночного диска имплантатом. Помимо биологической и химической совместимости с организмом имплантаты должны обладать ещё и механической совместимостью. Неправильный выбор протеза межпозвоночного диска может привести к ухудшению состояния костной ткани позвонков и функционированию позвоночника в целом.

Наличие подробной информации о напряженно-деформированном состоянии позвоночника и его структурных составляющих в норме и в случае их деградации позволит разработать рекомендации по созданию и выбору индивидуальных механически совместимых с организмом протезов и обеспечить нормальное функционирование позвоночника и восстановление его деградирующих элементов.

Межпозвоночный диск представляет собой композиционный материал со сложной организацией его элементов на каждом структурном уровне. Выделяют две основные структурные составляющие межпозвоночного диска: пульпозное ядро и фиброзное кольцо, образованное совокупностью концентрических пластин содержащих параллельные пучки коллагеновых волокон разной направленности.

В работе представлена модель межпозвоночного диска, учитывающая наличие пульпозного ядра и фиброзного кольца, содержащего коллагеновые волокна направленные под углами $\pm 45^\circ$ и $\pm 30^\circ$, проведены расчеты напряженно-деформированного состояния межпозвоночного диска и исследовано влияние процентного содержания слоев фиброзного кольца с разным направлением коллагеновых волокон на напряженно-деформированное состояние межпозвоночного диска.

Расчеты проводились в программном комплексе ANSYS с использованием метода конечных элементов.

DOI: 10.17223/9785946218412/115

**ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЙ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ В
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ Ni ПРИ СДВИГОВОМ НАГРУЖЕНИИ**

Крыжевич Д.С., Корчуганов А.В., Зольников К.П.

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Повышенное внимание к нанокристаллическим и наноразмерным материалам обусловлено их высокими прочностными и функциональными свойствами и возможностью миниатюризации устройств различного рода в электронике, медицине, робототехнике и т.д. Нанокристаллические металлические материалы уже сейчас имеют широкое практическое применение. При низких температурах они характеризуются высокой прочностью, вследствие зернограничного упрочнения (эффект Холла – Петча). При высоких температурах нанокристаллические материалы обладают сверхпластичностью благодаря зернограничному разупрочнению, что значительно облегчает технологические процессы. Из-за достаточно большого барьера Пайерлса дислокационное скольжение в нанокристаллических металлах существенно подавляется. В то же время усиливается роль различных мод зернограничной деформации или двойникования. Одновременно с зернограничным скольжением в нанокристаллических материалах развиваются аккомодационные процессы, которые трансформируют возникшие дефекты и понижают в их области напряжения, повышая тем самым пластичность материала. Поэтому изучению природы аккомодационных процессов в нанокристаллических материалах уделяется большое внимание. Эмиссия решеточных дислокаций из зоны тройных стыков, диффузия, ротационная деформация, расщепление и миграция границ зерен являются типичными примерами аккомодационных механизмов. Миграция и расщепление границ зерен, инициированные зернограничным скольжением, часто реализуются в виде коллективного механизма и существенно повышают эффективность аккомодационного процесса. В настоящей работе проведено молекулярно-динамическое изучение механизмов зарождения и развития пластичности в нанокристаллическом Ni в условиях высокоскоростного деформирования.

Поставленная задача решалась в рамках молекулярно-динамического подхода с использованием программного пакета LAMMPS. Расчеты были выполнены применительно к нанокристаллическому образцу Ni, состоящему из 9 зерен примерно одинакового размера с большими углами разориентации друг относительно друга. В одном из направлений образца моделировались жесткие захваты, к которым прикладывались сжимающие силы и сдвиг с постоянной скоростью. В двух других направлениях использовались периодические граничные условия. Моделируемый образец имел форму параллелепипеда и содержал около 1 млн. атомов (Рис. 1).

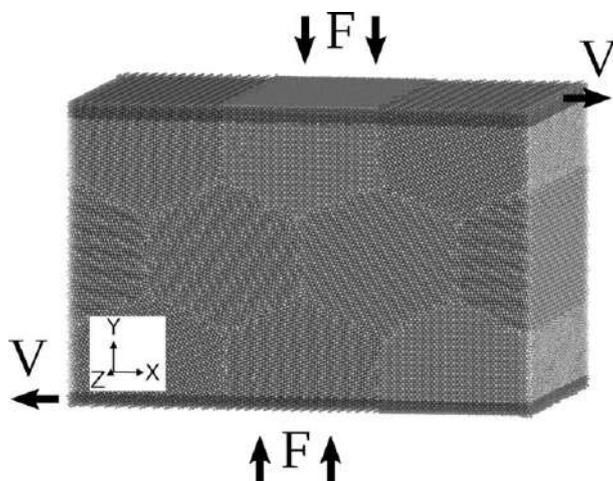


Рис. 1. Исходная структура образца и схема нагружения. F – прижимающая сила, V – скорость сдвига захвата

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Межатомное взаимодействие описывалось многочастичным потенциалом, рассчитанным в рамках метода погруженного атома. Начальная температура образца составляла 300К. Жесткие захваты смещались со скоростью V 5 м/с в противоположных направлениях. Прижимающая сила F , действующая на каждый захват, составляла 0.01 eV/Å. Анализ структуры осуществлялся с помощью алгоритма анализа по общим соседям. Визуализация результатов расчетов проводилась на основе графического пакета OVITO.

Результаты моделирования показывают, что зарождение пластичности в нанокристаллическом образце Ni начинается с формирования дефекта упаковки в области одного из тройных стыков зерен. При этом, одна из границ зерен, примыкающая к тройному стыку, испытывает растягивающие напряжения, а другая сжимающие. Такое перераспределение напряжений благоприятствует зарождению дефектов упаковки, по разные стороны которых всегда реализуются разноименные внутренние напряжения. По мере нагружения зародившийся дефект упаковки прорастает в тело одного из зерен. Отметим, что одновременно с генерацией дефектов упаковки в образце происходит нарастание числа атомов с ГПУ и неопределенной типом структуры ближайшего окружения. Зарождение дефектов упаковки является первым из реализующихся механизмов аккомодации образца на нагружение. При его исчерпании включается следующий аккомодационный механизм, связанный с миграцией границ зерен, что приводит к существенному перераспределению размера зерен.

Исследования были проведены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы (Приоритетное направление III.23).

DOI: 10.17223/9785946218412/116

**ОСОБЕННОСТИ ЗАРОЖДЕНИЯ ДЕФЕКТОВ В НАНОРАЗМЕРНЫХ КРИСТАЛЛАХ
С ОЦК РЕШЕТКОЙ**

Зольников К.П., Корчуганов А.В., Крыжевич Д.С.

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Проведено исследование атомных механизмов зарождения и развития пластичности в нанокристалле железа при одноосном однородном растяжении вдоль разных кристаллографических направлений. Расчеты проводились на основе метода молекулярной динамики с использованием многочастичных потенциалов. Показано, что дислокации и двойники являются основными носителями пластичности в изучаемом нанокристалле. Зарождение этих дефектов обусловлено структурными трансформациями, которые приводят к локальной смене типа кристаллической решетки. При одноосном однородном растяжении вдоль направления $[1\bar{2}1]$ в нанокристалле формируется двойник, на фронте распространения которого происходят прямые и обратные структурные трансформации кристаллической решетки по схеме ОЦК-ГЦК-ОЦК. Рост двойника сопровождается зарождением дислокаций в его теле. Значительное количество двойников формируется при одноосном растяжении кристаллита вдоль направления $[1\bar{1}0]$. При этом направлении растяжения не только ОЦК-ГЦК-ОЦК локальные структурные трансформации, но и трансформации ОЦК-ГПУ-ОЦК обеспечивают распространение двойников в объеме кристаллита. Однако вклад двойников в развитие пластичности при дальнейшем нагружении уменьшается и происходит трансформация значительной части двойников в дислокации. Зарождение пластичности имеет выраженную дислокационную природу при растяжении кристаллита вдоль направления $[111]$. Первые дислокации возникают на свободных поверхностях. Формирование последующих новых дислокаций связано с образованием локальных областей с ГЦК решеткой в окрестностях ранее сформированных дислокаций. Последующее растяжение кристаллита приводит к выходу значительной доли дислокаций на свободные поверхности. При этом в нанокристалле формируется сетка дислокаций и существенно повышается концентрация вакансий.

Обнаружено, что при упругом растяжении в локальных областях с повышенными напряжениями возникают мерцающие локальные структурные трансформации ОЦК-ГЦК-ОЦК. При этом, такие трансформации связаны с тепловыми флуктуациями атомной системы и их время жизни сопоставимо с периодом атомных осцилляций. Время жизни локальных областей с ГЦК структурой на фронте распространения двойника может в 5 раз и более превышать период атомных осцилляций и зависит от скорости распространения двойника.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/117

**МЕХАНИЗМЫ КОЛЛЕКТИВНЫХ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ,
ОБУСЛАВЛИВАЮЩИХ МИГРАЦИЮ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ВАНАДИИ
ПРИ СДВИГОВОМ НАГРУЖЕНИИ**

Корчуганов А.В., Крыжевич Д.С., Зольников К.П.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Изучены особенности структурных трансформаций в границах зерен кристаллита ванадия при интенсивных сдвиговых нагрузках. Исследования проводились на основе молекулярно-динамического моделирования для кристаллитов с симметричными наклонными границами зерен. Напряжение задавалось в виде смещения граней кристаллита параллельных плоскости границы. Обнаружено, что сдвиговая нагрузка вызывает высокоскоростную миграцию границ зерен в направлении нормали к их плоскости. Скорость миграции границы в зависимости от угла разориентации зерен и скорости сдвига может меняться в широком интервале и достигать нескольких сотен метров в секунду. Движение границ зерен носит скачкообразный характер и сопровождается быстрым сбросом внутренних напряжений. Вследствие кристалличности структуры и симметричности наклонных границ зерен процесс накопления и сброса напряжений повторяется периодически. Обнаружено, что миграция границ зерен реализуется за счет определенной последовательности смещений атомных плоскостей одного из зерен, примыкающих к границе. Эти плоскости поочередно перестраиваются в структуру атомных плоскостей границы зерен до тех пор, пока не подстроится под структуру растущего зерна. Не смотря на достижение высоких значений напряжений в процессе сдвига, миграция границ зерен происходит без зарождения дефектов структуры.

Исследования выполнены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/118

**ВЗАИМОСВЯЗЬ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ЭНЕРГИИ
И ПЛОТНОСТИ УПАКОВКИ В α -Fe**

^{1,2}Бакулин А.В., ^{1,2}Кулькова С.Е.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

Механические свойства конструкционных материалов, таких как стали и сплавы на основе железа, существенно зависят от состава и микроструктуры. Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования показали, что границы зерен влияют на пластичность, ползучесть, диффузию газов и примесей, самодиффузию, кинетику разрушения и многие другие свойства. Границы зерен образуются, когда два по-разному ориентированных кристалла имеют общую плоскую поверхность. Если различие в ориентации кристаллов мало, то такие границы раздела называют малоугловыми границами наклона. В общем случае границы зерен не проявляют периодичность, однако в кристаллах с кубической симметрией наблюдаются границы зерен с периодической структурой [1]. Атомная структура симметричных границ наклона интенсивно изучалась в литературе. Так в работе [2] было показано, что границы наклона отличаются существенно от объемной структуры лишь в узкой области порядка нескольких параметров решетки, однако именно в этой области наблюдаются интересные интерфейсные явления. Вследствие этого границы раздела можно рассматривать как самостоятельную фазу, структура и свойства которой отличаются от объемных. Кроме того, в реальных поликристаллических материалах наблюдается сегрегация примесей к границам зерен, а также их диффузия вдоль границ. Считается, что именно этим объясняется явление водородного охрупчивания материалов, поскольку в результате данного процесса водород, накапливаясь на границах зерен, может способствовать разрушению материала по границе зерна. Зернограничная диффузия контролирует кинетику многих микроструктурных изменений, фазовых превращений и других важных процессов в материалах, которые являются критическими с точки зрения их производства и технологического применения [3].

Понимание процессов, протекающих с участием границ зерен, невозможно без знания особенностей их атомной и электронной структуры. Экспериментальные методы исследования, такие как просвечивающая электронная микроскопия, микродифракция, каналирование электронов и другие, отличаются трудоемкостью, специфическими требованиями к размеру и форме зерен, а также своей локальностью [4]. В этой связи эффективным методом изучения структуры и свойств границ зерен являются теоретические методы из первых принципов. В настоящей работе проводится сравнительное изучение термодинамических, структурных и электронных характеристик нескольких симметричных границ наклона в α -Fe.

Расчеты атомной и электронной структуры границ наклона проводились методом проекционных присоединенных волн (PAW) с обобщенным градиентным приближением для обменно-корреляционного функционала в форме PBE. Для моделирования границ зерен использовался подход суперячеек, при этом в каждой ячейке было две границы наклона. Рассматривались следующие границы наклона: $\Sigma 3(111)$, $\Sigma 3(211)$ и $\Sigma 5(210)$, $\Sigma 5(310)$, представленные на рис. 1. Поскольку α -Fe является ферромагнетиком, то проводились спин-поляризованные расчеты. Для интегрирования по зоне Бриллюэна использовалась сетка k -точек, генерируемая по схеме Монхорста–Пака. Число k -точек выбиралось так, чтобы для каждого направления их плотность была $\sim 30 \text{ \AA}$. В таблице 1 приведены параметры суперячеек до релаксации, а также число k -точек для всех рассмотренных симметричных границ наклона.

Таблица 1. Структурные параметры и соответствующие сетки k -точек.

Граница	$\Sigma 3(111)[110]$	$\Sigma 3(211)[110]$	$\Sigma 5(210)[001]$	$\Sigma 5(310)[001]$
Число атомов N	24	24	20	40
Угол наклона α , °	109.47	70.53	53.13	36.87
a , Å	6.934	4.903	6.330	8.952
b , Å	4.003	4.003	2.831	2.831

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

$c, \text{Å}$	9.806	13.868	12.659	17.903
k -сетка	$5 \times 8 \times 4$	$6 \times 9 \times 2$	$5 \times 12 \times 2$	$4 \times 12 \times 2$

Оценка зернограничной энергии проводилась по формуле

$$\gamma_{GB} = (E_{GB} - \mu_{Fe} N_{GB}) / 2S, \quad (1)$$

где E_{GB} – полная энергия суперячейки, содержащей две границы зерен и N_{GB} атомов, μ_{Fe} – химический потенциал железа, рассчитанный для объемного металла в ОЦК фазе. Поскольку при формировании границы наклона некоторые атомы в приграничной области оказываются значительно ближе друг к другу, чем в объеме металла, то ее модификация проводилась путем удаления одного из пары таких атомов, а оставшийся атом сдвигался в плоскость границы раздела. Поэтому формально одна и та же граница наклона может содержать разное число атомов в приграничной области. Среди рассмотренных границ наклона к таким относится $\Sigma 5(210)$, приведенная на рис. 1в,г. Отметим, что данное обстоятельство отмечалось также в работе [5] для этой же границы наклона. В то же время в работе [6], напротив, в структуру границы наклона $\Sigma 5(210)$ добавлялся атом, чтобы увеличить расстояние между близко расположенными атомами.

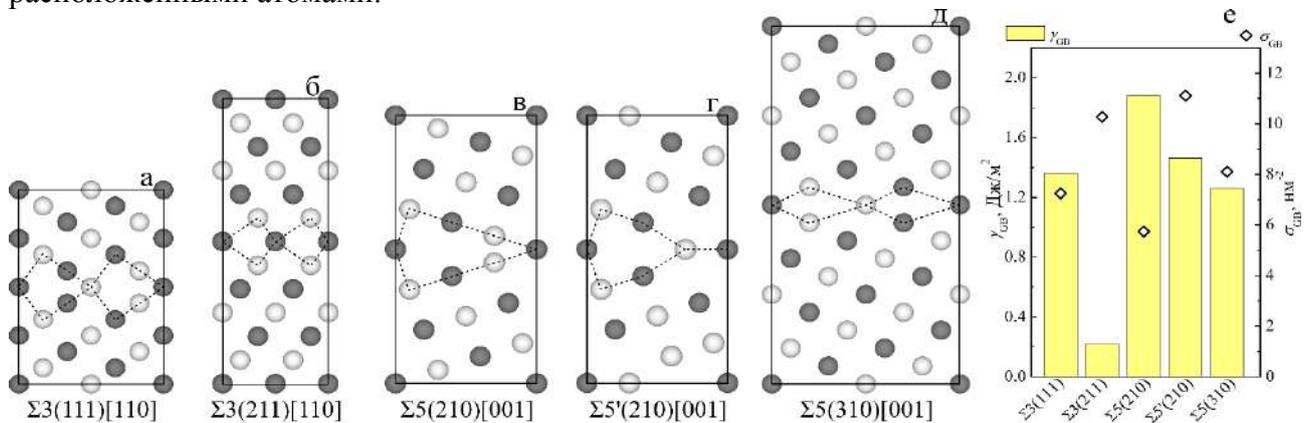


Рис. 1. Атомная структура рассмотренных границ наклона (а–д), а также рассчитанные зернограничные энергии и плотность атомов в плоскости границы наклона (е). Светлыми и темными шариками показаны атомы железа, лежащие в разных атомных плоскостях $z = 0.0$ и $z = 0.5$

На рис. 1е приведены рассчитанные зернограничные энергии, а также соответствующие плотности упаковки атомов в плоскости границы. Полученные значения зернограничных энергий хорошо согласуются с данными других авторов [5,6]. В целом повышение термодинамической стабильности границ наклона (понижение γ_{GB}) коррелирует с повышением плотности атомов в плоскости границы (σ_{GB}). Отметим, что в случае границы наклона $\Sigma 5(210)$ удаление одного из близкорасположенных атомов приводит к повышению плотности упаковки атомов в два раза, тогда как зернограничная энергия изменяется в меньшей степени. Анализ магнитного состояния атомов железа показал, что магнитный момент атомов, лежащих в плоскости границы наклона, является наибольшим 2.32 – $2.65 \mu_B$ в зависимости от типа границы. С удалением от плоскости границы магнитный момент осциллирует и сходится к объемному значению. В работе анализируются также локальные плотности электронных состояний атомов железа, особенности химической связи между ними.

1. Mrovec M., Ochs T., Elsasser C., Viter V., Nguyen-Manh D., Pettifor D. Never ending saga of a simple boundary // Zeitschrift für Metallkunde. 2003. № 93. P. 244–249.
2. Bolman W. Crystal Defects and Crystalline Interfaces (Springer, Berlin, 1970).
3. Gupta D. Diffusion, Solute Segregations and Interfacial Energies in Some Material: An Overview // Interface Science. 2003. № 11. P. 7–20.
4. Валиев Р.З., Вергазов А.Н., Герцман В.Ю. Кристаллогеометрический анализ межкристаллитных границ в практике электронной спектроскопии (Наука, Москва, 1991).
5. Wang J., Madsen G.K.H., Drautz R. Grain boundaries in bcc-Fe: a density-functional theory and tight-binding study // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2018. № 26. P. 025008-1–22.
6. Tschopp M., Gao F., Sun X. The effects of the uncertainty of thermodynamic and kinetic properties on nucleation and evolution kinetics of Cr-rich phase in Fe-Cr alloys // Report of Army Research Laboratory ARL-CR-0705. 2012. P. 1-42.

DOI: 10.17223/9785946218412/119

**ВЛИЯНИЕ КИСЛОРОДА И ФТОРА НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ
ПОВЕРХНОСТИ InAlAs**

^{1,2}Бакулин А.В., ²Фукс А.А., ³Аксенов М.С., ³Валишева Н.А., ^{1,2}Кулькова С.Е.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

³*Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск*

Полупроводниковые соединения $A^{III}B^V$ такие как InAs и GaAs, а также их тройные (квазибинарные) соединения, например $In_xAl_{1-x}As$, являются перспективными материалами для создания приборных транзисторов с высокой подвижностью электронов, СВЧ-фотодетекторов и ряда других приборов [1,2]. В частности, на основе гетероэпитаксиальных меза-структур $In_{0.52}Al_{0.48}As/In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$ изготавливаются СВЧ-фотодиоды с барьером Шоттки, используемые в качестве быстрых детекторов в аналоговых волоконно-оптических линиях в спектральном диапазоне 1.55 мкм. Параметры этих приборов определяются характеристиками границ раздела металл/InAlAs и диэлектрик/InAlAs(InGaAs). В последнем случае важной задачей является формирование границы раздела диэлектрик/полупроводник с низкой плотностью интерфейсных состояний. Кроме приборов на основе структур металл-диэлектрик-полупроводник (МДП), последнее актуально для тех случаев, когда требуется качественная пассивация поверхности меза-структуры, например, для СВЧ-фотодиода. Сложность создания стабильных границ раздела с низкой плотностью интерфейсных состояний обусловлена негативным влиянием собственных оксидов. Кроме того, различные дефекты состава и структуры интерфейсной области также способствуют повышению плотности интерфейсных состояний ($>5 \cdot 10^{11} \text{ эВ}^{-1}\text{см}^{-2}$) и закреплению уровня Ферми [3,4]. В настоящее время для улучшения свойств границ раздела полупроводников с собственными оксидами активно развивается направление, называемое «пассивацией». В рамках этого направления разрабатываются новые технологии химической обработки поверхности полупроводников $A^{III}B^V$ и нанесения на нее пассивирующих покрытий [4] с целью уменьшения скорости поверхностной рекомбинации и открепления уровня Ферми путем создания переходных слоев определенного состава.

Одним из способов модификации поверхности полупроводников при создании МДП структур является контролируемый рост фторсодержащих анодных оксидных слоев (ФАОС) в различных жидких и газовых средах. Для InAs это обеспечивает низкую плотность состояний ($<5 \cdot 10^{10} \text{ эВ}^{-1}\text{см}^{-2}$) в случае границы раздела ФАОС/InAs(111)A. Исследования данного интерфейса показали, что переходная область имеет кристаллическую структуру и состоит из фторидов и оксифторидов элементов полупроводника. Для понимания микроскопических механизмов появления/устранения интерфейсных состояний в последние десятилетия активно используется моделирование в рамках теории функционала плотности, которое позволяет детально исследовать электронное строение и химическую связь на границах раздела.

В настоящей работе методом проекционных присоединенных волн с использованием обобщенного градиентного приближения для обменно-корреляционного функционала и метода DFT-1/2 изучена адсорбция кислорода и фтора в ряде симметричных позиций на нереконструированной поверхности InAlAs(111)A. Расчеты показали, что, как и на поверхности бинарных полупроводников $A^{III}B^V$ [5], кислород предпочитает адсорбироваться в мостиковой В-позиции между двумя поверхностными анионами (рис. 1а). При этом энергия связи (E_b) в Al-B позиции на 1.81 эВ выше, чем в In-B (таблица 1), тогда как в позиции смешанного моста InAl-B энергия связи принимает промежуточное значение. В случае фтора предпочтительной является вершинная Al-T позиция над атомом алюминия поверхностного слоя. Из таблицы 1 видно, что в наиболее предпочтительной позиции энергия адсорбции кислорода выше, чем фтора на 1.63 эВ.

Таблица 1. Энергии связи кислорода и фтора на поверхности InAlAs(111)A-(2×2).

Позиция	Al-B	In-B	InAl-B	Al-T	In-T
$E_b(O)$, эВ	8.11	6.30	7.45	6.70	5.19
$E_b(F)$, эВ	6.39	4.95	–	6.48	6.04

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

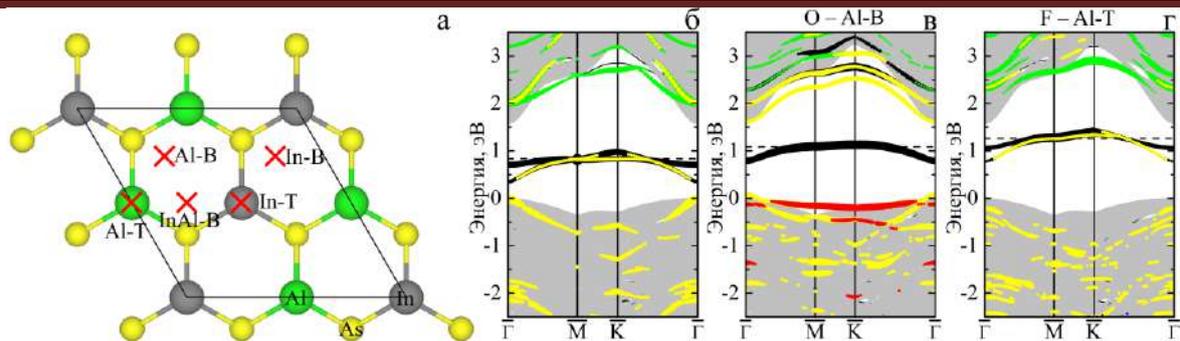


Рис. 1. Атомная структура поверхности InAlAs(111)A-(2×2) и рассмотренные позиции адсорбции, показанные крестиками (а); электронные энергетические спектры чистой поверхности (б) и поверхности с адсорбированным атомом кислорода (в) и фтора (г) в наиболее предпочтительных позициях. Поверхностные состояния, локализованные на атомах фтора, кислорода, индия, алюминия и мышьяка показаны синими, красными, черными, зелеными и желтыми шариками соответственно. Размер шарика указывает на степень локализации электронных состояний.

Электронные энергетические спектры чистой поверхности и поверхности с адсорбированными атомами кислорода и фтора приведены на рис. 1б-г. Видно, что на чистой поверхности (рис. 1б) имеет место пиннинг уровня Ферми состояниями поверхностных атомов индия и подповерхностных атомов мышьяка. Интересно, что состояния алюминия при этом являются незанятыми и находятся в зоне проводимости. Последнее может быть обусловлено тем обстоятельством, что электроотрицательность алюминия на 0.17 меньше, чем индия, что способствует большему переносу заряда от атомов алюминия к мышьяку и опустошение их состояний. Это же объясняет большую предпочтительность электроотрицательных адсорбатов образовывать связь с атомами алюминия, чем с индием. На примере кислорода в Al-B позиции (рис. 1в) хорошо видно, что его адсорбция приводит к опустошению состояний именно мышьяка, хотя атомы алюминия являются ближайшими соседями кислорода. При этом происходит перераспределение электронной плотности от мышьяка к кислороду через алюминий. В случае фтора (рис. 1г) описанное выше перераспределение электронного заряда также имеет место, хотя и в меньшей степени. Поскольку фтор образует связь только с одним поверхностным атомом, это приводит к меньшему искажению электронной структуры поверхности. Отметим, что при концентрации кислорода и фтора, равной 0.25 монослоя, не наблюдается открепление уровня Ферми. Мы демонстрируем, что увеличение концентрации адатомов кислорода приводит к повышению плотности состояний в запрещенной щели вследствие смещения поверхностных состояний из валентной зоны. Увеличение концентрации фтора, напротив, вызывает смещение состояний из запрещенной щели в зону проводимости, что и приводит к откреплению уровня Ферми. В целом полученные результаты способствуют лучшему пониманию энергетики связи электроотрицательных адсорбатов с полупроводниковыми полярными поверхностями.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 18-32-00548 мол_а), а также в рамках проекта III.23.2.8. ИФПМ СО РАН. Численные расчеты выполнены на суперкомпьютере SKIF-Cyberia в Томском государственном университете.

1. Takahashi T., Kawano Y., Makiyama K. et al. Enhancement of f_{max} to 910 GHz by adopting asymmetric gate recess and double-side-doped structure in 75-nm-gate InAlAs/InGaAs HEMTs // IEEE Transactions on Electron Devices. 2017. V. 64. № 1. P. 89–95.
2. Chizh A., Malyshev S., Mikitchuk K. High-speed high-power InAlAs/InGaAs/InP schottky photodiode // 2015 International Topical Meeting on Microwave Photonics (MWP). 2015. P. 223–226.
3. Hinkle C.L., Vogel E.M., Ye P.D. et al. Interfacial chemistry of oxides on $In_xGa_{(1-x)}As$ and implications for MOSFET applications // Current Opinion in Solid State & Materials Science. 2011. V. 15. P. 188–207.
4. Robertson J., Guo Y., Lin L. Defect state passivation at III-V oxide interfaces for complementary metal-oxide-semiconductor devices // Journal of Applied Physics. 2015. V. 117. P. 112806-1–10.
5. Bakulin A.V., Kulkova S.E., Aksenov M.S. et al. Fluorine and oxygen adsorption and their coadsorption on the (111) surface of InAs and GaAs // The Journal of Physical Chemistry C. 2016. V.120. P. 17491–17500.

DOI: 10.17223/9785946218412/120

РАСЧЕТЫ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ КИСЛОРОДА В СПЛАВАХ Ti-Al:
ПЕРВОПРИНЦИПНЫЙ ПОДХОД

^{1,2}Кулькова С.Е., ^{1,2}Бакулин А.В., ²Кульков С.С.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

Сплавы на основе Ti-Al нашли широкое применение в различных отраслях промышленности, в частности, в аэрокосмической, автомобильной, судостроительной и других. Эти сплавы обладают целым комплексом хороших механических свойств, таких как высокая прочность, пластичность, жаропрочность, а также имеют высокую температуру плавления и низкую плотность. В то же время основным недостатком сплавов с уменьшением содержания алюминия является недостаточная коррозионная стойкость при высоких температурах, что ограничивает их практическое применение [1]. Экспериментально было показано, что это может быть обусловлено ростом смешанных оксидных слоев титана и алюминия [1-4], поскольку оба элемента имеют высокое сродство к кислороду. В настоящее время до конца остается не ясным, чем определяется кинетика окисления сплавов Ti-Al. Формирование TiO₂ связано с окислением титана на поверхности оксида, тогда как окисление алюминия происходит на внутренней границе раздела оксид-сплав [3,4]. Поэтому, согласно одной из точек зрения, кинетика окисления определяется диффузией кислорода [4], тогда как в [5] утверждается, что именно поверхностные процессы играют определяющую роль при окислении Ti-Al сплавов. Таким образом, одним из возможных путей контроля процесса окисления Ti-Al сплавов является управление диффузионными свойствами кислорода. Настоящая работа посвящена сравнительному изучению диффузионных свойств кислорода в ряду сплавов Ti₃Al-TiAl-TiAl₃.

Расчеты атомной и электронной структуры бинарных сплавов Ti-Al проводился методом проекционных присоединенных волн (PAW) в плосковолновом базисе с использованием обобщенного градиентного приближения для обменно-корреляционного функционала. Оптимизация атомной структуры проводилась с использованием динамики Ньютона до достижения минимальных сил на атомах поверхностных слоев ~0.01 эВ/Å. Для сплавов TiAl₃, γ-TiAl и α₂-Ti₃Al использовалась суперячейки (2×2×1), (2×2×2) и (2×2×2) соответственно. Сетка k-точек 7×7×7, генерируемая по схеме Монхорста-Пака использовалась для двух первых сплавов, тогда как Г-центрированная сетка 3×3×4 – в последнем случае. Напомним, что сплавы TiAl₃ и γ-TiAl имеют тетрагональную структуру с D₀₂₂ и L₁₀ симметрией (рис. 1а,б). Теоретические параметры решетки этих сплавов равны $a = 3.842 \text{ \AA}$, $c = 8.616 \text{ \AA}$ и $a = 3.989 \text{ \AA}$, $c = 4.068 \text{ \AA}$, что хорошо согласуется с экспериментальными значениями $a = 3.849 \text{ \AA}$, $c = 8.609 \text{ \AA}$ [6] и $a = 3.984 \text{ \AA}$, $c = 4.060 \text{ \AA}$ [6] соответственно. Сплав α₂-Ti₃Al имеет гексагональную D₀₁₉ структуру (рис. 1в), а его структурные параметры $a = 5.736 \text{ \AA}$ и $c = 4.639 \text{ \AA}$ также находятся в хорошем согласии с экспериментальными значениями $a = 5.736 \text{ \AA}$ и $c = 4.639 \text{ \AA}$ [7]. Для оценки энергетических барьеров диффузии кислорода в сплавах использовался метод подталкивающих упругих связей в модификации восходящих изображений (Climbing Image Nudged Elastic Band, CI-NEB) [8]. Задавалось начальное и конечное положение кислорода, а промежуточные положения рассчитывались методом линейной интерполяции. Эти конфигурации, называемые изображениями, считались связанными пружиной и релаксировались одновременно. Использование такого подхода позволяет определить конфигурацию с максимальной энергией, то есть седловую точку. Диффузионный барьер оценивался как разность между энергиями системы с кислородом в исходном равновесном состоянии и седловой точке. Температурный коэффициент диффузии кислорода рассчитывался как сумма парциальных коэффициентов по всем возможным путям диффузии. Учитывались вероятности нахождения кислорода в конкретных позициях, частоты перескоков между позициями, а также среднее время таких прыжков. Кроме того, в расчете коэффициента

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

диффузии учитывались значения энергетических барьеров вдоль разных путей и энергии абсорбции (E_{abs}) во всех рассмотренных позициях.

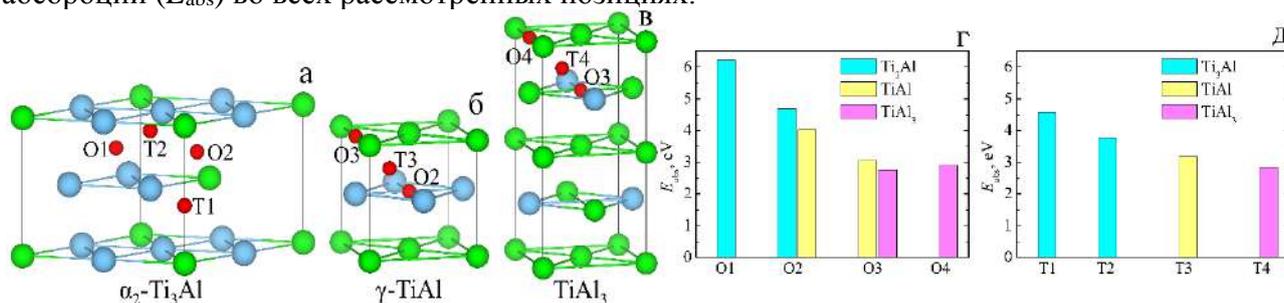


Рис. 1. Позиции абсорбции кислорода в сплавах Ti_3Al (а), $TiAl$ (б), $TiAl_3$ (в), а также рассчитанные энергии абсорбции в октаэдрических (О) и тетраэдрических (Т) позициях (г, д)

Рассчитанные энергии абсорбции кислорода в ряде октаэдрических и тетраэдрических позициях представлены на рис. 1г,д. Видно, что в целом увеличение E_{abs} коррелирует с увеличением содержания титана в локальном окружении кислорода. Наибольшие энергии миграции кислорода получены для путей между позициями, обогащенными титаном. Например, в сплаве Ti_3Al энергетический барьер между O1-позициями вдоль [0001] направления равен 3.48 эВ [9], что выше, чем барьер между O2→O2 в сплаве $TiAl$ (3.02 эВ) [10]. Показано, что миграционные барьеры кислорода в Ti-Al сплавах понижаются с уменьшением титана в локальном окружении кислорода и, в целом, в сплаве. Рассчитанные температурные коэффициенты диффузии по двум направлениям в кристаллической решетке Ti_3Al и энергии активации диффузии находятся в хорошем согласии с экспериментом [11]. В то же время коэффициенты диффузии в сплавах $TiAl$ и $TiAl_3$ выше на пять–семь порядков, чем в Ti_3Al , при этом анизотропия диффузии с увеличением содержания алюминия в сплавах возрастает. Обсуждается также проблема расчета коэффициента диффузии кислорода в легированных сплавах. Показано, что ниобий и тантал способствуют повышению энергии активации диффузии, если занимают наиболее предпочтительную титановую подрешетку.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ (N 18-03-00064_a), а также в рамках проекта III.23.2.8. ИФПМ СО РАН. Численные расчеты выполнены на суперкомпьютере SKIF-Cyberia в Томском государственном университете и Lomonosov-1 в Московском государственном университете.

- Li Z., Gao W. High temperature corrosion of intermetallics, in *Intermetallics Research Progress*. Ed. by Berdovsky Y.N. (Nova Sci., New York, 2008). P. 1–64.
- Umakoshi Y., Yamaguchi M., Sakagami T., Yamane T. Oxidation resistance of intermetallic compounds Al_3Ti and $TiAl$ // *Journal of materials science*. 1989. № 24. P. 1599–1603.
- Schmitz-Niederer M., Schütze M. The oxidation behavior of several Ti-Al alloys at 900°C in air // *Oxidation of Metals*. 1999. № 52. P. 225–240.
- Maurice V., Despert G., Zanna S., Josso P., Bacos M.-P., Marcus P. XPS study of the initial stages of oxidation of α_2 - Ti_3Al and γ - $TiAl$ intermetallic alloys // *Acta Materialia*. 2007. № 55. P. 3315–3325.
- Ramachran M., Mantha D., Williams C., Reddy R.G. Oxidation and diffusion in Ti-Al-(Mo, Nb) intermetallics // *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2011. № 42. P. 202–210.
- Braun J., Ellner M. Phase equilibria investigations on the aluminum-rich part of the binary system Ti-Al // *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2001. № 32. P. 1037–.
- Villars P., Calvert L.D. *Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases*, 2nd ed. (ASM Int., Materials Park, OH, 1991).
- Henkelman G., Uberuaga B.P., Jónsson H. A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths // *Journal of Chemical Physics*. 2000. № 113. P. 9901–9904.
- Бакулин А.В., Латышев А.М., Кулькова С.Е. Адсорбция и диффузия кислорода в сплаве Ti_3Al // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2017. № 152. С. 164–176.
- Бакулин А.В., Кулькова С.Е., Ху Ц.М., Янг Р. Теоретическое изучение сорбции и диффузии кислорода в объеме и на поверхности сплава γ - $TiAl$. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2015. № 147 (2). С. 292–304.
- Koizumi Y., Kishimoto M., Minamino Y., Nakajima H. Oxygen diffusion in Ti_3Al single crystals // *Philosophical Magazine*. 2008. № 88. P. 2991–3010.

DOI: 10.17223/9785946218412/121

ВЛИЯНИЕ ЛЕГИРОВАНИЯ НА АДГЕЗИОННЫЕ СВОЙСТВА
ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА Ti_3Al/Al_2O_3

^{1,2}Бакулин А.В., ^{1,2}Фукс А.А., ^{1,2}Кулькова С.Е.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

Интерметаллические сплавы на основе титана и алюминия являются перспективными материалами для высокотемпературных применений, поскольку обладают целым комплексом хороших механических свойств, таких как высокая удельная прочность, высокая пластичность и жаропрочность. Несмотря на интенсивные исследования на протяжении последних десятилетий, эти интерметаллические сплавы остаются в центре внимания как теоретических, так и экспериментальных работ. Известно, что недостаточная коррозионная стойкость сплавов Ti_3Al и $TiAl$ значительно ограничивает область их применения. Экспериментально было показано, что низкая коррозионная стойкость сплавов с меньшим содержанием алюминия связана с ростом смешанных оксидных слоев, содержащих оксиды титана и алюминия [1]. Хотя внешняя оксидная пленка образована преимущественно диоксидом титана, на внутренней границе раздела формируется оксид алюминия [1]. Обеднение интерфейсных слоев сплава алюминием на данной границе раздела приводит к формированию внутреннего интерфейса Ti_3Al/Al_2O_3 , адгезионные свойства которого практически не изучались теоретическими методами. Целью настоящей работы является изучение атомной и электронной структуры границы раздела $Ti_3Al(0001)/Al_2O_3(0001)$, а также влияния сегрегации примесей с ОЦК структурой на ее адгезионные свойства и адсорбцию кислорода на поверхности сплава.

Расчет атомной и электронной структуры границы раздела $Ti_3Al(0001)/Al_2O_3(0001)$ проводился методом проекционных присоединенных волн (PAW) с обобщенным градиентным приближением для обменно-корреляционного функционала. Для моделирования границы раздела использовался подход тонких пленок, разделенных промежутком вакуума толщиной ~ 15 Å. Суперячейка содержала один интерфейс, при этом использовались следующие поверхностные ячейки $Al_2O_3(0001)-(2 \times 2)$, $Me(111)-(2 \times 2)$ и $Ti_3Al(0001)-(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ (рис. 1). Параметр поверхностных ячеек был равен 9.773 Å, что соответствует растяжению решетки оксида и сжатию решетки сплава на 1.6%. В этом случае промежуточные слои металла растягивались в плоскости границы раздела на 4.0%. Адсорбция кислорода рассматривалась на одной стороне пленки сплава $Ti_3Al(0001)$, тогда как вторая сторона фиксировалась при объемных значениях.

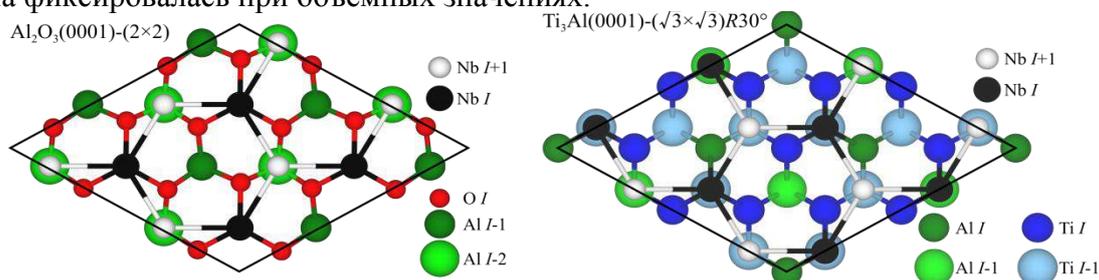


Рис. 1. Поверхностные ячейки $Al_2O_3(0001)_O$ (слева) и Ti_3Al (справа), используемые для моделирования границы раздела, а также положение атомов ОЦК примеси (Nb) интерфейсного (I) и второго от интерфейса (I+1) слоев на обеих поверхностях

Несколько слов необходимо сказать о влиянии ОЦК металлов на энергию адсорбции кислорода на поверхности $Ti_3Al(0001)$. Как показано в работе [2] границы раздела между этими металлами и оксидом алюминия демонстрируют наибольшую адгезию. В случае Nb и Mo на подрешетке титана наблюдается понижение энергии адсорбции (E_{ads}) кислорода в наиболее предпочтительной F1-позиции на 0.37-0.62 эВ по сравнению с чистой поверхностью, тогда как при замещении алюминия E_{ads} в F2-позиции, ближайшей к примеси, напротив, возрастает на 0.31-0.56 эВ. Если примесь находится во вторых соседях, то E_{ads} понижается на 0.28 эВ в случае Nb, тогда как Mo практически не влияет на энергетику связи кислорода на поверхности. Рассмотрение структурных и электронных характеристик позволило объяснить

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

влияние примесей на энергетику связи кислорода на поверхности сплава. В частности уменьшение E_{ads} при замещении титана объясняется понижением ионного вклада в механизм химической связи кислорода с поверхностью, тогда как увеличение E_{ads} при замещении алюминия в первых соседях обусловлено более сильной $O\ p - Me\ s,d$ гибридизацией по сравнению с $O\ p - Al\ s,p$. В случае сегрегации металлов на границу раздела Ti_3Al/Al_2O_3 наблюдается аналогичный эффект в изменении энергии адгезии: замещение титана ниобием приводит к уменьшению энергии адгезии на $0.11\ \text{Дж/м}^2$ (таблица 1), тогда как замещение алюминия – к ее увеличению на $0.14\ \text{Дж/м}^2$. Отметим, что в первом случае замещался один из девяти атомов титана, а во втором – один из трех атомов алюминия в интерфейсном слое. Был рассмотрен также случай формирования промежуточной пленки металла на интерфейсе, при этом на обеих границах раздела Al_2O_3/Nb и Nb/Ti_3Al моделировались наиболее энергетически предпочтительные конфигурации (рис. 1).

Таблица 1. Энергия адгезии на интерфейсе $Al_2O_3(0001)_O/Nb(111)/Ti_3Al(0001)$ в зависимости от числа слоев ниобия и положения плоскости разрыва.

Интерфейс	Плоскость разрыва	$W_{\text{sep}}, \text{Дж/м}^2$
Al_2O_3/Ti_3Al	Al-Al-O Ti_3Al-Ti_3Al	11.02
	Al-Al-O $Ti(Nb)_3Al-Ti_3Al$	10.91
	Al-Al-O $Ti_3Al(Nb)-Ti_3Al$	11.16
$Al_2O_3/Nb-1/Ti_3Al$	Al-Al-O $Nb-Ti_3Al-Ti_3Al$	10.34, 10.8 [3], 12.5 [4]
	Al-Al-O-Nb Ti_3Al-Ti_3Al	2.23
$Al_2O_3/Nb-2/Ti_3Al$	Al-Al-O $Nb-Nb-Ti_3Al-Ti_3Al$	10.37
	Al-Al-O-Nb $Nb-Ti_3Al-Ti_3Al$	4.12, 3.8 [3], 4.0 [4]
	Al-Al-O-Nb-Nb Ti_3Al-Ti_3Al	4.29
$Al_2O_3/Nb-3/Ti_3Al$	Al-Al-O $Nb-Nb-Nb-Ti_3Al-Ti_3Al$	10.39, 9.81 [3], 9.91 [4]
	Al-Al-O-Nb $Nb-Nb-Ti_3Al-Ti_3Al$	4.72
	Al-Al-O-Nb-Nb $Nb-Ti_3Al-Ti_3Al$	6.75
	Al-Al-O-Nb-Nb-Nb Ti_3Al-Ti_3Al	4.75

Из таблицы 1 видно, что в случае трехслойной пленки Nb энергия адгезии на границе $Al_2O_3/Nb-Nb-Nb-Ti_3Al$ незначительно больше, чем на интерфейсе с пленкой ниобия, тогда как, напротив, она меньше на интерфейсе $Al_2O_3/Nb-Ti_3Al$, чем в случае отрыва монослоя ниобия от оксида. Последнее объясняется сильной ионной составляющей в механизме связи монослоя металла с оксидом. Большая W_{sep} на интерфейсе Al_2O_3/Ti_3Al по сравнению с Al_2O_3/Nb обусловлена также большей ионной составляющей, поскольку перенос заряда от Ti к кислороду выше, чем от ниобия. В то же время на границе раздела Al_2O_3-Nb/Ti_3Al наблюдается существенное падение энергии адгезии по сравнению с интерфейсом Al_2O_3/Ti_3Al . Видно, что работа отрыва, когда плоскость разрыва проходит между ниобием и сплавов увеличивается с ростом числа атомных слоев ниобия ($2.23-4.29-4.61\ \text{Дж/м}^2$), что обусловлено структурными факторами: растяжение пленки металла в плоскости границы раздела приводит к уменьшению межплоскостных расстояний, что позволяет атомам второго и третьего слоев металла взаимодействовать с поверхностными атомами сплава. Проводится детальный анализ локальных плотностей электронных состояний, переноса заряда через интерфейс, заселенности перекрывания орбиталей и др. Обсуждаются микроскопические механизмы, ответственные за изменение работы отрыва на границах раздела оксид-сплав с металлическими слоями с ОЦК структурой.

Работа частично выполнена при финансовой поддержке РФФИ (N 18-03-00064_a), а также в рамках проекта III.23.2.8. ИФПМ СО РАН. Численные расчеты выполнены на суперкомпьютере SKIF-Cyberia в Томском государственном университете.

1. Maurice V., Despert G., Zanna S. et al. XPS study of the initial stages of oxidation of α_2-Ti_3Al and $\gamma-TiAl$ intermetallic alloys // Acta Mater. 2007. V. 55. P. 3315–3325.
2. Мельников В.В., Кулькова С.Е. Адгезия на границах раздела между ОЦК металлами и $\alpha-Al_2O_3$ // ЖЭТФ. 2012. Т. 141. № 2. С. 345–354.
3. Batirev I.G., Alavi A., Finnis M.W. et al. First-principles calculations of the ideal cleavage energy of bulk niobium(111) α -alumina(0001) interfaces // Phys. Rev. B. 1999. V. 82. № 7. P. 1510–1513.
4. Ereemeev S., Schmauder S., Hocker S., Kulkova S. Investigation of the electronic structure of $Me/Al_2O_3(0001)$ interfaces // Physica B. 2009. V. 404. P. 2065–2071.

DOI: 10.17223/9785946218412/122

ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИДНОГО КОМПОЗИТА
С УЧЕТОМ «ПЛАВЛЕНИЯ»

¹Букрина Н.В., ^{1,2}Князева А.Г.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

Способ получения интерметаллидного композита в режиме динамического теплового взрыва представляет собой достаточно сложный процесс, включающий в себя одновременно протекающие процессы разной природы. При изучении химических реакций вместе с процессами переноса и другими сопутствующими явлениями, необходим учет тепловых и кинетических явлений, приводящих к формированию структуры и свойств новых материалов. Для гетерогенных систем особенности математического моделирования связаны с представлением источника тепловыделения, связанного с реакциями, с описанием процессов теплопереноса и формирования структуры. Высокие скорости реакций в условиях объемного высокотемпературного синтеза интерметаллического соединения из исходных веществ создают значительные трудности в управлении процессом формирования конечного продукта. С целью прогноза и управления технологическими параметрами высокотемпературного синтеза требуется привлекать математическое моделирование, позволяющее выявить определяющие факторы.

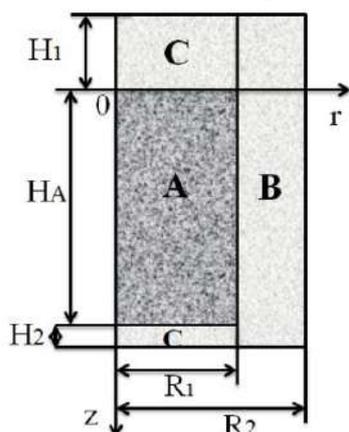


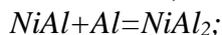
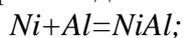
Рис. 1. Схематическое изображение процесса инициирования реакции в порошковой смеси в режиме теплового взрыва при ее нагреве индукционным источником в стальном цилиндрическом реакторе

синтеза. Скорости реакций зависят от температуры по закону Аррениуса, а от концентраций в соответствии с законом действующих масс. Полагаем, что реакции начинаются при появлении жидкой фазы.

Задача решалась численно по неявной разностной схеме второго порядка аппроксимации по пространству и первого по времени, с использованием расщепления по координатам и линейной прогонки. Численный алгоритм и программа позволяют проследить не только за изменением температуры по пространству и по времени, но и изучить в динамике образование доли продуктов в данном технологическом процессе при различных условиях проведения эксперимента.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук, проект № III.23.2.2.

В работе предложена двумерная математическая модель высокотемпературного синтеза интерметаллида в режиме динамического теплового взрыва при нагреве порошковой прессовки в стальном цилиндрическом реакторе. Математическая постановка задачи, соответствующая рис.1, сводится к решению двумерного уравнения теплопроводности в различных областях (реакционной смеси и стенок реактора) с учетом сопряженного теплообмена между областями. Тепловыделение в объеме возможно вследствие химических реакций, из которых выделим три:



На основе стандартных уравнений баланса записаны формально-кинетические уравнения для нахождения доли чистых соединений и продуктов

DOI: 10.17223/9785946218412/123

**ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ И ДЛИТЕЛЬНОСТИ ВНЕШНЕГО ИМПУЛЬСА НА
ДИНАМИКУ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ МАТЕРИАЛА МЕЖДУ ТОНКОЙ ПЛЕНКОЙ
И ПОДЛОЖКОЙ**

Парфенова Е.С., Князева А.Г.
ИФПМ СО РАН, Томск

Поверхностная обработка концентрированными потоками энергии позволяет получать новые материалы с уникальными свойствами, которые отвечают современным технологическим требованиям. Наибольший интерес в этой области представляют низкоэнергетические сильноточные электронные пучки, с помощью которых можно формировать твердые растворы, интерметаллиды и нитриды в приповерхностном слое металлов и сплавов, что приводит к значительному улучшению физико-механических и эксплуатационных свойств [1,2]. В работе [3] показано, что при воздействии на поверхность пучками электронов в режиме отсутствия плавления в поверхностных слоях и объеме металлических материалов наблюдаются значительные изменения состава и структуры. Обработка электронными пучками также используется для улучшения адгезии системы покрытие-подложка [2,4].

Кроме таких процессов как нагрев, фазообразование, перемешивание и т.д., в момент взаимодействия потока электронов с поверхностью мишени происходит генерация упругих волн механических возмущений [5]. Все указанные процессы протекают одновременно, поэтому их экспериментальное исследование затруднено. В отличие от экспериментальных работ, математическое моделирование позволяет детально исследовать процесс обработки на всех его стадиях, изучить роль каждого возникающего явления в отдельности и выявить взаимосвязь между интересующими процессами.

В литературе встречаются модели для исследования особенностей термоупругих волн, вызванных воздействием высокоэнергетических источников на поверхности материалов, но стоит отметить, что редко встречаются связанные модели электронно-лучевой обработки, в которых учитываются одновременно протекающие процессы разной физической природы.

В настоящей работе представлена связанная математическая модель начальной стадии процесса взаимодействия потока электронов с поверхностью металла с предварительно нанесенной тонкой пленкой. Предположим, что возникающие напряжения - упругие, скорости, ускорения и деформации малы, тогда для описания взаимодействия волн концентрации, тепловых волн и волн напряжений (деформаций) при воздействии потока электронов необходимы уравнение баланса массы (1), уравнение теплопроводности (2) и уравнение движения (3). Определяющие соотношения соответствуют теории обобщенной термоупругой диффузии. Внутренняя граница разделяет материалы с разными свойствами (покрытие - А, подложка - В). Для каждой из областей необходимо записать свои уравнения:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + {}^t D_k \frac{\partial^2 C_k}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_k \frac{\partial C_k}{\partial x} - \frac{B_k C_k}{\rho_k} \frac{\partial \sigma_k}{\partial x} \right], \quad (1)$$

$$\rho_k C_{\sigma k} \left[{}^t q_k \frac{\partial^2 T_k}{\partial t^2} + \frac{\partial T_k}{\partial t} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_{T_k} \frac{\partial T_k}{\partial x} \right] - \alpha_{T_k} T_k \frac{\partial \sigma_k}{\partial t} - {}^t q_k \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_{T_k} T_k \frac{\partial \sigma_k}{\partial t} \right], \quad (2)$$

$$\frac{\rho_k}{E_k} \frac{\partial^2 \sigma_k}{\partial t^2} + \rho_k \alpha_{T_k} \frac{\partial^2 T_k}{\partial t^2} + \rho_k \Delta \alpha_k \frac{\partial^2 C_k}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \sigma_k}{\partial x^2}, \quad (3)$$

где C_k - концентрация диффузанта в покрытии ($k=A$) и в подложке ($k=B$); ρ_k - плотности материалов, кг/м³; σ_k - компонента тензора напряжений в материалах $k=A$ и $k=B$ в направлении облучения; T_k - температура, К; α_{T_k} - коэффициенты теплового расширения, К⁻¹; $C_{\sigma k}$ - теплоемкость, Дж/(кг К); ${}^t D_k$ - время релаксации потока массы к равновесному

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

состоянию, c ; t_{qk} - время релаксации потока тепла к равновесному состоянию, c ; B_k - коэффициент переноса массы под действием напряжений; D_k - коэффициент диффузии, m^2/c ; λ_{Tk} - коэффициент теплопроводности, $Вт/(м К)$; $\Delta\alpha_k = \alpha_k - \alpha_0$ - разность коэффициентов концентрационного расширения диффузанта α_k и основного α_0 материала; E_k - модуль упругости, Па; $k = A, B$.

Граница раздела материала покрытия и подложки находится на расстоянии h от левой границы, соответствующей началу координат. Полагаем, что на границе раздела имеет место идеальный контакт, тогда

$$x = h: u_A = u_B, \quad \sigma_A = \sigma_B, \quad C_A = C_B, \quad \mathbf{J}_A = \mathbf{J}_B, \quad \mathbf{J}_{qA} = \mathbf{J}_{qB},$$

где u_A, u_B - компоненты вектора перемещений в направлении Ox слева и справа от границы.

Граничные и начальные условия имеют вид:

$$\begin{aligned} x = 0: \quad \mathbf{J}_A = 0, \quad \mathbf{J}_{qA} = q_0\varphi(t), \quad \sigma_A = \sigma_0\varphi(t), \\ x \rightarrow \infty: \quad C_B = 0, \quad \sigma_B = 0, \\ t = 0: \quad C_k = \begin{cases} 1.0, & 0 \leq x \leq h \\ 0.0, & x > h \end{cases}, \quad \sigma_k = 0, \quad T_k = T_0, \quad \frac{\partial C_k}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_k}{\partial t} = 0. \end{aligned}$$

где $\varphi(t)$ - функция внешнего воздействия:

Синусоидальный импульс -

$$\varphi(\tau) = \begin{cases} A \sin\left(\frac{\pi\tau}{\tau_{imp}}\right), & \tau \leq \tau_{imp} \\ 0, & \tau > \tau_{imp} \end{cases},$$

Прямоугольный импульс -

$$\varphi(\tau) = \begin{cases} A, & \tau \leq \tau_{imp} \\ 0, & \tau > \tau_{imp} \end{cases}.$$

Представленная модель позволяет изучать взаимодействие нелинейных волн разной физической природы, распространяющихся совместно в неизотермических условиях. Предполагается, что частицы обладают энергией, достаточной для генерации упругих волн механических возмущений в поверхности мишени, и приводят к изменению температуры. Модель учитывает конечность времен релаксации потоков тепла и массы и взаимодействие волн различной физической природы - диффузия, напряжения (деформации) и температура. Разработанный численный алгоритм основан на неявной разностной схеме.

Взаимодействие изучаемых процессов приводит к искажениям на волнах деформации и температуры.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Konovalov S.V. et al. Structure of titanium alloy, modified by electron beams and destroyed during fatigue // Letters on materials. 2017. Т. 7. № 3. С. 266-271.
2. Углов В.В., Квасов Н.Т., Петухов Ю.А., Кудактин Р.С., Коваль Н.Н., Иванов Ю.Ф., Тересов А.Д., Асташинский В.М., Кузьмицкий А.М. Структурно-фазовые превращения в системе титан-кремний, модифицированной сильноточным электронными пучками и компрессионными плазменными потоками // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2012. №4. С. 9-16.
3. Lu J., Wei D.Q., Wang R., Sui X.M., Yin J.W. Surface polishing and modification of 3Cr2Mo mold steel by electron beam irradiation // Vacuum. 2017. V.143. P. 283-287.
4. Ласковнев А.П., Иванов Ю.Ф., Петрикова Е.А. и др. Модификация структуры и свойств эвтектического силумина электронно-ионно-плазменной обработкой. Минск: Беларус. навука, 2013. 287 с.
5. Бойко В.И., Скворцов В.А., Фортов В.Е., Шаманин И.В. Взаимодействие импульсных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Физматлит, 2003. 288 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/124

**СУБМОНОСЛОЙНАЯ АДсорбция ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ
НА ПОВЕРХНОСТЬ Cu(001)**

^{1,2}Русина Г.Г., ^{1,2}Борисова С.Д.

¹ИФПМ СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

Щелочные металлы (АМ) образуют много различных упорядоченных адсорбционных структур на металлической поверхности, что приводит к определенной перестройке атомов подложки и к появлению новых адсорбат-индуцированных свойств поверхности. В настоящей работе, с использованием потенциалов межатомного взаимодействия, генерируемых в рамках метода погруженного атома, изучена равновесная кристаллическая структура и колебательные свойства упорядоченных структур Cu(001)-*c*(2 × 2)-Na, Li and Cu(001)-*c*(4 × 2)-K, образующихся при субмонослойной адсорбции атомов Li, Na и K на поверхности Cu (001).

Проведен анализ поверхностной релаксации, фононных спектров для всех направлений высокой симметрии зоны Бриллюэна, а также рассчитаны локальные плотности колебательных состояний (LDOS), как для адсорбированных слоев, так и субстрата. Обнаружено, что адсорбция щелочных металлов приводит к небольшой модификации поверхностной атомной структуры Cu(001). Во всех адсорбированных структурах наблюдается смещение внешнего атомного слоя меди в направлении адслоя. Это смещение наибольшее для Na (0.026Å) и наименьшее для K (0.006Å). В результате адсорбции щелочных металлов локализованные фононные моды поверхности Cu(001) модифицируются, более выраженные изменения происходят при адсорбции натрия и лития. Наряду с этим возникают моды преимущественно локализованные на адсорбатах. Для структуры Cu(001)-*c*(2 × 2)- Li немного выше объемного спектра меди появляется дипольно-активная колебательная мода, отражающая характер взаимодействия адсорбата с подложкой.

Расчетная энергия этой моды, равная ~38 мэВ, находится в хорошем согласии с HAS измерениями [1]. Для более тяжелых адсорбатов Na и K наблюдается широкий резонанс в объемном фононном спектре меди. Это приводит к широкому пику в локальной плотности состояний с максимумом при 18 мэВ и 12 мэВ для Na и K. Полученные значения этих мод хорошо согласуются с данными эксперимента HREELS [2].

1. Senet P., Toennies J., Witte G. Low-frequency vibrations of alkali atoms on Cu(001) // Chem. Phys. Lett. 1999. V. 299. P. 389-394.
2. Rudolf P., Astaldi C., Cautero G., Modesti S. Study of alkali metal adsorption on reconstructed and unreconstructed Cu surfaces by HREELS S // Surf. Sci. 1991. V. 251/252. P. 127-131.

DOI: 10.17223/9785946218412/125

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ НАБОРА ПРОЧНОСТИ
МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫХ БЕТОННЫХ СМЕСЕЙ**

¹Дмитриева М.А., ¹Лейцин В.Н., ¹Шаранова А.В.

¹*Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград*

Развитая модель физико-химических процессов в реагирующих дискретных системах [1] позволяет прогнозировать структурных характеристики, эффективные механические свойства, кинетику технологических процессов, степень усадки, остаточные напряжения в композиционных материалах, получаемых в процессе спекания и химических превращений многофазных полидисперсных систем.

К подобным композиционным материалам с иерархической структурой можно отнести современные мелкозернистые бетоны. Бетоны нового поколения характеризуются наличием в своем составе механоактивированных цементно-песчаных компонентов, с добавками, обеспечивающими требуемые реологические свойства и кинетику набора прочности. Механическая активация обеспечивает нарастание прочности бетона в начальные сроки твердения и более полное использование вяжущих свойств цемента [2, 3].

Математическая модель представляется совокупностью нестационарных задач теплового баланса и макрокинетики химических превращений. Термомеханическое состояние и фазовый состав реагирующей среды рассматриваются одновременно на макро и микроскопических уровнях. Структура исходного компакта спекаемого композита отражает неоднородность концентраций и размеров исходных порошковых компонентов и пор в отдельных слоях и межслойных интерфейсах, полифракционность компонентов и их конгломератов. На каждом шаге моделирования в каждом микрослое используются эффективные характеристики материала, определяемые макроскопической структурой исходного компакта, распределением в нем исходных компонентов и пор, неоднородностью концентраций, фазового и фракционного состава компонентов [1].

Образование структуры композиционных материалов на основе портландцемента связана с образованием синтетических гидросиликатов кальция (ГСК). Последние являются основным связующим компонентом и определяют механическую прочность композитов на основе цементной дисперсной системы. Образование ГСК - это химический процесс, требующий для своего протекания определенной энергии активации [4].

Актуальной проблемой является подбор композиций строительных смесей, пригодных для реализации аддитивных технологий в строительстве [5]. Использование ультрадисперсных механоактивированных добавок песчано-цементных смесей в исходных композициях бетонных смесей обеспечивает необходимое условие быстрого схватывания бетона [6]. Подобная модификация исходной смеси эффективна для получения прочных бетонов без существенного увеличения цементного связующего. Существенное увеличение скорости схватывания механоактивированных цементно-песчаных добавок позволяет рассматривать их в качестве отдельной фазы бетона. Макрокинетика химических процессов гидратации мелкозернистых бетонов с фракцией механоактивированных компонентов в настоящее время практически не изучена.

В представленной работе обсуждается подход определения параметров макрокинетики процессов схватывания бетонных растворов через кинетические характеристики набора прочности при различных температурах.

Экспериментально подтверждена активационная природа процессов гидратации бетонной смеси и определены параметры макрокинетики.

Работа выполняется при поддержке гранта РФФИ № 19-48-390001 "Многокомпонентные наномодификаторы бетонных смесей".

1. Vladimir N. Leitsin, Maria A. Dmitrieva, Tatiana V. Kolmakova Governing Factors of Physical and Chemical Behavior of Reactive Powder Materials // Powder Metallurgy Research Trends / Editors Lotte J. Smit and Julia H. VanDijk. Nova Science Publishers, Inc. NY, 2008.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

2. Andreeva, A.V., Burenina, O.N., Savvinova, M.E. Activity improvement of sticky Portland cements by methods of mechanical activation // Materials Science Forum 2018 945 MSF, p. 3-8
3. Sulimenko, L.M., Krivoborodov, Yu.R. Effect of mechanical activation of raw materials on clinker formation and cement properties // Russian Journal of Applied Chemistry, 2000. 73(5), pp. 757-759
4. Макридин Н.И., Королев Е.В., Максимова И.Н. Структурообразование и конструкционная прочность цементных композитов. Москва: МГСУ, 2013. 152 с.
5. Dmitrieva, M., Leitsin, V., Sharanova, A., Tovpinets, A. Complex approach to the study of modern concrete characteristics // MATEC Web of Conferences 2018 Selection of compositions for additive technologies in construction251,01024
6. Sharanova, A., Dmitrieva, M. Selection of compositions for additive technologies in construction // E3S Web of Conferences 97, 06018 (2019) <https://doi.org/10.1051/e3sconf/20199706018> FORM-2019

DOI: 10.17223/9785946218412/126

СОВРЕМЕННЫЕ СПОСОБЫ ОПИСАНИЯ СТРУКТУРЫ ПОРОВОГО
ПРОСТРАНСТВА ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

^{1,2}Смолин А.Ю., ^{1,2}Еремина Г.М., ¹Коростелев С.Ю.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

В связи с существенным влиянием структуры порового пространства на прочностные и упругие свойства пористых материалов, а также широкими возможностями современных технологий по формированию сложных многоуровневых поровых структур, определённый интерес представляет вопрос о современных способах достаточно полного описания и характеристики таких структур.

Традиционно считается, что структура порового пространства характеризуется следующими параметрами: пористость, её распределение по объёму, вид пор (открытые или закрытые, и т.д.), просвет, форма и коэффициент извилистости пор, распределение пор по размерам, удельная поверхность пор, проницаемость и распределение проницаемости по площади фильтрации.

Анализ современной литературы показывает, что в настоящее время для описания структуры различных сложных сред наиболее часто используются три новых подхода. Первый основан на интегральной геометрии и использует так называемые функционалы Минковского. Второй использует тензоры строения (*fabric tensors*), которые могут быть основаны как на геометрическом подходе, так и на механике деформируемого тела и морфологии. Третьим подходом является использование корреляционных функций.

Использование функционалов Минковского. Известно, что в топологии морфология трёхмерных структур полностью определяется четырьмя значениями функционалов Минковского (теорема Хадвигера [1])

$$\begin{aligned} V_0 &= \iiint dV \\ V_1 &= \frac{1}{6} \iint dS \\ V_2 &= \frac{1}{6\pi} \iint (\kappa_1 + \kappa_2) dS \\ V_3 &= \frac{1}{4\pi} \iint \kappa_1 \kappa_2 dS \end{aligned} \quad (1)$$

где κ_1 и κ_2 – главные кривизны. При этом V_0 – это объём, V_1 – площадь поверхности структуры, а их отношение даёт её толщину $T=V_0/2V_1$. Физический смысл значений V_2 и V_3 не так однозначен, но с их помощью можно вычислить ширину W и длину L структуры. Кроме того, используются понятия уплощённости P и нитевидности F . Тогда, например, простейшие структуры характеризуются следующими их значениями: линия $P = 0, F = 1$; плоскость $P = 1, F = 0$; сфера $P = F = 0$.

Если с помощью сканера или томографии перевести какую-либо структуру в сеточное представление, то существует алгоритм Олдера вычисления функционалов Минковского через такие величины, как n_0 – число узлов сетки внутри структуры; n_1 – число полных рёбер; n_2 – число полных граней; n_3 – число полных кубов; N – общее число узлов сетки. В таком виде, например, анализ топологии по значениям функционалов Минковского используется в вычислительной магнитогидродинамике для понимания структуры завихрённости потока и возникающих магнитных полей.

Использование тензоров строения. В современной научной литературе для описания особенностей структуры различных материалов широко используется понятие *fabric tensor*, которое на русский язык можно перевести как тензор структуры или тензор строения [2]. По-видимому, изначально он стал применяться для описания строения геологических сред [3], затем в медицине для изучения строения костных тканей [4], и, наконец, в материаловедении

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

для композитов [5]. Вообще говоря, под fabric tensor понимаются различные тензорные величины, которые так или иначе характеризуют структурную чувствительность материала. Поэтому в обзоре [2] методы их вычисления подразделяются на механические (простейший – тензор жёсткости), морфологические (те же функционалы Минковского), объёмные (тензор инерции) и текстурные (фрактальная размерность, частота отклонения текстуры от прямых линий).

Использование корреляционных функций. В работе [6] отмечается, что общее количество информации, содержащейся в функционалах Минковского, значительно меньше, чем необходимо для описания даже относительно простой структуры. В то же время существует метод, который позволяет количественно описать внутреннее строение какого-либо объекта, и основан на расчёте так называемых корреляционных функций [7]. Важно, что корреляционные функции позволяют оценить, сколько информации они могут нести о данной структуре. Такая оценка производится путём исследования параметров алгоритма реконструкции и количества вырожденных состояний, когда один и тот же набор корреляционных функций соответствует разным структурам [8]. Простейший тип корреляционной функции (n -точечная корреляционная функция) показывает вероятность нахождения n точек в одинаковой фазе. При этом значение 1-точечной корреляционной функции равно объёмной доли бинарной фракции. 2-точечная корреляционная функция определяется как вероятность одновременного нахождения точек x_1 и x_2 в одинаковой фазе (поры или твёрдая фаза пористого материала) и является наиболее изученной функцией для описания случайных сред.

В работе [6] отмечается, что для описания и восстановления гетерогенных сред недостаточно 2-точечных корреляционных функций и в сложившихся условиях наиболее правильным можно считать направление в повышении точности описания структур с помощью дополнительных функций низкого порядка ($n \leq 2$). Каждая из них представляет вероятность того, что положение точек на концах отрезка или отрезок целиком должны удовлетворять некоторым условиям. В качестве таких функций были предложены: а) кластерная функция (концы отрезка находятся внутри одного кластера); б) линейная функция (весь отрезок находится в одной фазе); в) функция хорды; г) различные функции поверхностей; д) функция размера пор.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований Российской академии наук на 2013–2020 гг. (приоритетное направление III.23).

1. Klain, D.A. Introduction to geometric probability / D.A. Klain, G.-C. Rota. – Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
2. Moreno, R. Techniques for computing fabric tensors: a review / R. Moreno, M. Borga, Ö. Smebby // C.-F. Westin et al. (eds.), Visualization and processing of tensors and higher order descriptors for multi-valued data, mathematics and visualization, Berlin: Springer-Verlag. – 2014. – P. 271–292.
3. Launeau, P., Robin, P.Y.F.: Fabric analysis using the intercept method / P. Launeau, P.Y.F. Robin // Tectonophysics. – 1996. – Vol. 267(1–4). – P. 91–119.
4. Tabor, Z., Quantifying anisotropy of trabecular bone from gray-level images / Z. Tabor, E. Rokita // Bone. – 2007. – Vol. 40(4). – P. 966–972.
5. Voyiadjis, G.Z. Advances in Damage Mechanics: Metals and Metal Matrix Composites with an Introduction to Fabric Tensors / G.Z. Voyiadjis, P.I. Kattan. 2006. – Elsevier, Oxford.
6. Карсанина, М.В. Моделирование и реконструкция структуры и свойств пористых сред с помощью корреляционных функций / М.В. Карсанина // дисс... канд. физ.-мат. н., Институт динамики геосфер Российской академии наук, 2016. – 137 с.
7. Torquato, S. Random heterogeneous media: Microstructure and improved bounds on effective properties / S. Torquato // Appl. Mech. Rev. – 1991. – 44. – P. 37-76.
8. Gommes, C.J. Microstructural degeneracy associated with a two-point correlation function and its information content / C.J. Gommes, Y. Jiao, S. Torquato // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. – 2012. – 85(5). – 051140.

DOI: 10.17223/9785946218412/127

ПОСТРОЕНИЕ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ V-W НА ОСНОВЕ ДАННЫХ CALPHAD ОБ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ

Максименко В.Н., Липницкий А.Г., Неласов И.В.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород

Методы компьютерного моделирования на атомном уровне используются для повышения эффективности разработки новых перспективных материалов благодаря получению информации о процессах в материалах на уровне детальности, не доступной в экспериментальных подходах.

В данной работе разработан новый метод построения межатомных потенциалов для моделирования сплавов, который основан на подходе, изложенном в [1]. Для оптимизации параметров потенциальных функций используются экспериментальные и CALPHAD данные. С применением данного метода впервые построены потенциалы для бинарной системы V-W на основе заданных потенциалов V и W.

На рисунке 1 приведены энтальпии образования твердых растворов в сплавах V-W, рассчитанные с помощью разработанного нами потенциала POT_VW, в сравнении с данными CALPHAD [2] при температуре 2000K и нашими расчетами методом ТФП при 0K с использованием известного пакета VASP.

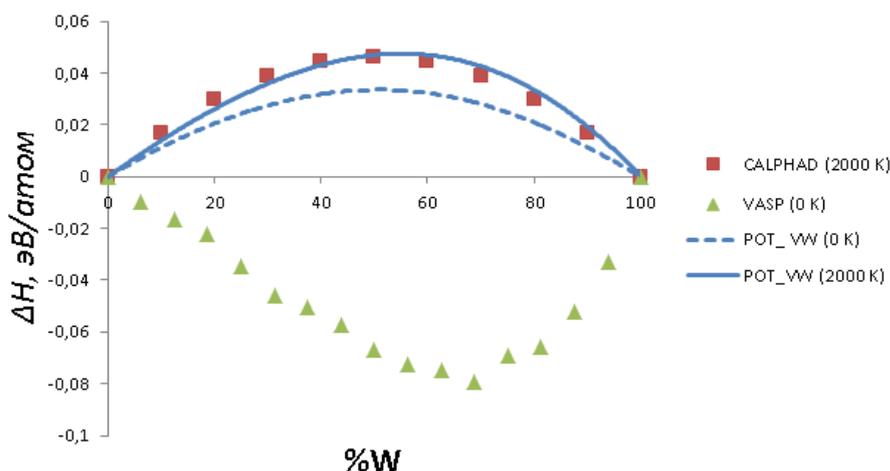


Рис. 1. Энтальпии образования твердых растворов в сплавах V-W

Как видно из рисунка 1 потенциал POT_VW прогнозирует энтальпии образования в сплаве V-W при температуре 2000K в хорошем согласии с данными CALPHAD, основанными на результатах экспериментальных исследований. Результаты наших ТФП расчетов показывают отрицательный знак энтальпии образования во всей области концентраций сплавов V-W в согласии с результатами ТФП расчетов других авторов. Это указывает на проблему ошибок ТФП, связанных с использованием модельного вида плотности обменно-корреляционной энергии для системы V-W. В связи с этим нами разработан новый метод построения межатомных потенциалов в сплавах на основе экспериментальных и CALPHAD данных об энтальпии образования и параметрах решеток без привлечения ТФП расчетов. Построенные потенциалы могут быть использованы для моделирования сплавов системы V-W в широком интервале температур, а разработанный метод позволит строить потенциалы для других сплавов.

Работа была выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-02-00585.

1. Lipnitskii A.G., Saveliev V.N. Development of n-body expansion interatomic potentials and its application for V //Computational Materials Science. 2016. V. 121. P. 67-78.
2. Predel B. VW (Vanadium-Tungsten) //Pu-Re-Zn-Zr. – Springer, Berlin, Heidelberg, 1998. – С. 1-3.

DOI: 10.17223/9785946218412/128

**МЕЖАТОМНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФФУЗИОННЫХ
ПРОЦЕССОВ В ВОЛЬФРАМЕ**

Липницкий А.Г., Максименко В.Н., Неласов И.В., Картамышев А.И.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород

В современном материаловедении прогноз выделения вторичных фаз, сегрегации на границах зерен и результатов других диффузионных процессов в металлах и сплавах является важной составляющей разработки новых перспективных металлических материалов. Вместе с тем экспериментальные исследования этих процессов часто ограничены недостаточным пространственно-временным разрешением приборной базы. Компенсировать отмеченные ограничения во многом позволяет использование метода молекулярной динамики на основе полуэмпирических межатомных потенциалов.

К настоящему времени разработан ряд моделей для описания взаимодействий между атомами, с использованием которых построены потенциалы для многих металлических систем. Часть потенциалов воспроизводят параметры решетки, энергии связи, модули упругости и другие характеристики металлов в хорошем согласии с экспериментальными данными. Однако соответствие задачам исследования диффузионных процессов дополнительно налагает специфические требования к качеству межатомных потенциалов, которые должны прогнозировать энергии образования и миграции точечных дефектов, а также температуру плавления и тепловое расширение в хорошем согласии с экспериментальными данными. Поскольку коэффициенты диффузии существенно зависят от гомологической температуры и на них значительное влияние оказывает размерный фактор, корректный учет которого в широком диапазоне температур возможен только при точном воспроизведении теплового расширения.

В докладе представлен краткий анализ существующих методов задания межатомных взаимодействий в контексте приложения к изучению диффузионных процессов в металлах и сплавах. Обсуждаются ограничения современных методов построения потенциалов на основе расчетов в рамках теории функционала электронной плотности (ТФП), которые наследуют ошибки ТФП, связанные с модельным заданием плотности обменно-корреляционной энергии. Отмечается подход к построению межатомных потенциалов [1], позволяющий более точно прогнозировать диффузионные характеристики в сравнении с ТФП, благодаря использованию, одновременно, экспериментальных и ТФП данных для оптимизации параметров потенциалов. В этом случае экспериментальные данные обеспечивают точность прогноза характеристик материалов, а использование ТФП энергий и сил для ряда модельных решеток повышает переносимость потенциалов на атомные конфигурации, не использованные при оптимизации. Ошибки ТФП нивелируются масштабированием межатомных расстояний и энергий ТФП. Достоинством подхода [1] является использование математически точного выражения потенциальной энергии системы атомов как функции их координат в виде суммы многочастичных взаимодействий, которое приведено к практически реализуемому виду с точным заданием трехчастичных взаимодействий и учитывает бесконечный ряд взаимодействий более высокого порядка в рамках центрально-симметричного приближения [1]. Это позволяет обойти влияние моделей химической связи при задании аналитического вида межатомных взаимодействий на достоверность прогноза характеристик материалов с ковалентным и металлическим характером химической связи, к которым относятся ОЦК металлы, включая W.

В работе впервые построен межатомный потенциал для моделирования диффузионных процессов, радиационных повреждений и широкого спектра других процессов в вольфраме, удовлетворяющий всем отмеченным выше требованиям к потенциалам, в рамках подхода [1] Потенциал также может быть использован для построения межатомных потенциалов в сплавах, списки компонентов которых включают вольфрам.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-02-00585.

DOI: 10.17223/9785946218412/129

**РОЛЬ РОТАЦИОННЫХ МОД ДЕФОРМАЦИИ МЕЗОУРОВНЯ В ФОРМИРОВАНИИ
МАКРОСКОПИЧЕСКИХ КРИВЫХ ТЕЧЕНИЯ**

^{1,2}Макаров П.В., ^{1,2}Смолин И.Ю., ^{1,2}Бакеев Р.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

²*Томский государственный университет, Томск, Россия*

В рамках несимметричной теории упругопластического континуума Коссера в двухмерной постановке для плоской деформации выполнено моделирование неупругой локализованной деформации для однородных образцов и мезообъемов поликристаллического материала. Предполагается, что развитие ротационных мод деформации в нагружаемых материалах связано с развитием в нем локализованной пластической деформации и формированием в материале на микро и наноуровнях изгибов-кручений кристаллической решетки. По этой причине параметры моментной модели рассматриваются как функции неупругой деформации для каждого локального мезообъема среды. Показано, что значительный вклад в упрочнение макроскопических диаграмм нагружения вносят формирующиеся на мезоуровне моментные напряжения. Результаты моделирования свидетельствуют, что если в нагружаемом материале блокируются поворотные моды деформации, снижается аккомодационная способность материала, резко возрастает локальная и макроскопическая степень неупругой деформации и существенно быстрее формируются структуры разрушения. И наоборот, создание в материалах мезо и нано размерных субструктур с высокой кривизной кристаллической решетки способствует активизации ротационных мод деформации, снижению степени локализованной деформации и релаксации опасных концентраторов напряжений.

Данное научное исследование выполнено в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/130

**АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИСЛОКАЦИЙ
И ДИСЛОКАЦИОННЫХ БАРЬЕРОВ В ГЦК МОНОКРИСТАЛЛЕ МЕДИ**

Давлятшин Р.П., Волегов П.С.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

В настоящее время остро стоит задача проектирования и производства функциональных материалов, т.е. материалов с заранее определенными физико-механическими свойствами. В первую очередь, к таким свойствам относятся упругие, пластические характеристики, стойкость материалов к различным, в том числе экстремальным, условиям эксплуатации. Для создания таких материалов необходимо понимать, какие процессы происходят в материале на микроуровне, и научиться управлять этими процессами, т.к., в конечном счете, свойства металлов и сплавов зависят от распределения и взаимодействия дефектов различного типа [1]. Такого рода процессы невозможно непосредственно и детально наблюдать в натурном эксперименте, поэтому представляется актуальным использование различных прямых методов математического моделирования, в частности, метода молекулярной динамики, для изучения поведения материала на микроуровне.

Целью работы является разработка, численная реализация и исследование математической модели, которая бы позволила генерировать в соответствии с заданными параметрами различные дислокации и дислокационные структуры в ГЦК монокристалле, а также исследовать процессы их взаимодействия. Для достижения поставленной цели используется метод молекулярной динамики (МД) и метод погруженного атома (ЕАМ) [2, 3]:

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)} \Phi(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \quad (1)$$

где первое слагаемое – это сумма всех парных взаимодействий между атомами, $\Phi_{s_i s_j}(r_{ij})$ – функция парного взаимодействия между атомами i (химического элемента S_i) и j (химического элемента S_j), расположенным на расстоянии r_{ij} . Функция F_{s_i} – так называемая «энергия погружения» атома i , которая зависит от плотности электронов ρ_i в данной точке, созданной соседними атомами. Выбор потенциала является важным этапом построения математической модели, т.к. различные ЕАМ потенциалы, даже для одного и того же чистого материала, воспроизводят его свойства с разной степенью точности [4, 5]. В работе выбран потенциал для чистой меди, предложенный в работе [6], т.к. он достаточно точно описывает энергии дефектов кристаллической решетки.

Хорошо известно, что разориентировка и тип границы влияют на ее энергию [4], что необходимо учитывать при изучении взаимодействия дислокаций и границы зерен. Получение устойчивой межзеренной границы, вообще говоря, является отдельной задачей, результаты решения которой приведены, например, в [5]. В рамках работы для получения устойчивой межзеренной границы применяется метод имитации отжига, что существенно ускоряет вычислительный процесс и при этом не существенно влияет на конечную энергию границы.

В ходе работы предложен и реализован численный алгоритм внесения дислокаций и дислокационных барьеров различного типа в атомно-дискретную модель ГЦК монокристалла. Исследована устойчивость полученных дефектных структур с помощью метода молекулярной динамики. Изучены процессы взаимодействия краевых и петлевых дислокаций с дислокационными барьерами типа Ломера-Коттрелла (рис. 1) и Хирта, а также с сидячими дислокациями Франка. Для этого исследуемые дефекты вносились в атомно-дискретную модель ГЦК монокристалла, далее проводился процесс минимизации потенциальной энергии системы с помощью метода сопряженных градиентов, после чего монокристалл подвергался деформированию. Анализ эволюции дефектной структуры материала производился с использованием алгоритма выделения дислокаций (dislocation extraction algorithm, DXA) [7]. В результате проведенных численных экспериментов были получены зависимости характера взаимодействия дислокаций и дислокационных барьеров от их типа и энергии.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

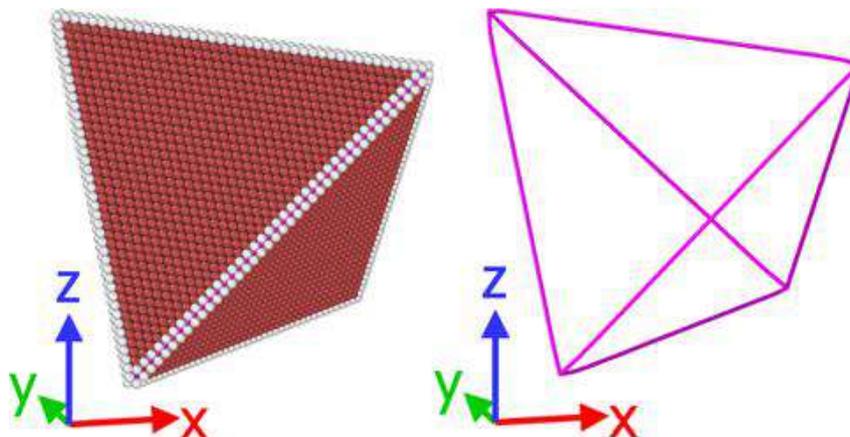


Рис. 1. Устойчивая конфигурация барьера Ломера-Коттрелла: результат работы алгоритма CNA (слева) и DXA (справа)

1. Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах/под ред. Бернштейна М.Л., Новикова И.И. – Москва: Металлургия, 1980. – 153 с.
2. Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation SE. – Cambridge: Cambridge university press, 2004. – 549 pp.
3. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29, No. 12. – pp. 6443-6453.
4. Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 1: Потенциалы для однокомпонентных систем // *Вестник ПНИПУ. Механика*. – 2017. – № 4. – С. 214–237. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.14
5. Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 2: Потенциалы для многокомпонентных систем // *Вестник ПНИПУ. Механика*. – 2018. – № 2. – С. 114–132. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.2.11
6. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., Kress J.D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding and embedded atom method calculations // *Physical Review B*. – 2001. – V. 63, No. 22. – 224106. doi: 10.1103/PhysRevB.63.224106
7. Stukowski A., Bulatov V. V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2012. – Vol. 20, No. 8. – 085007. DOI: 10.1088/0965-0393/20/8/085007

DOI: 10.17223/9785946218412/131

**ОЦЕНКА НАПРЯЖЕНИЙ И ДЕФОРМАЦИЙ ПРИ РОСТЕ НОВОЙ ФАЗЫ МЕЖДУ
ЧАСТИЦЕЙ И МАТРИЦЕЙ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА КОМПОЗИТА**

Анисимова М.А., Князева А.Г.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

При получении композитов между частицей и матрицей образуется переходный слой. Состав и ширина данного слоя зависят от многочисленных технологических параметров процесса (температуры, давления, времени синтеза и т.п.). Используя подходящую модель формирования переходного слоя, можно изучить эволюцию размеров переходной зоны и свойств получаемых материалов в динамике в зависимости от условий синтеза [1, 2]. В общем случае такие модели могут быть реализованы лишь численно, в особенности для многокомпонентных сред и при условии формирования нескольких фаз.

Кроме того, процесс образования новой фазы и движение границы сопровождаются диффузией, приводящей к перераспределению концентраций. Эти процессы приводят к появлению диффузионных (концентрационных) напряжений из-за разницы в подвижности диффузанта в фазах и различия свойств фаз.

В работе представлена модель для оценки напряжений и деформаций в процессе формирования переходного слоя между сферической частицей и матрицей в процессе синтеза композита.

Модель включает в себя задачу реакционной диффузии с подвижными границами, где граница раздела движется вследствие роста новой фазы [3]. В этом случае явно принимается, что скорость собственно реакции много выше скорости диффузии, что позволяет заменить зону реакции поверхностью раздела [4].

В квазистационарном приближении [5] диффузионная задача разделится на две подзадачи: нахождение распределения концентрации в областях заданных размеров и определение положения границ раздела фаз. Подзадача о нахождении положения границ решается численно. Затем находится распределение концентрации во всех областях в зависимости от положения границ. Задача о механическом равновесии решается аналитически. Результат зависит от положения границ и распределения концентраций.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.1.4.

1. Kryukova O. N., Knyazeva A. G., Pogrebenkov V. M., Kostikov K. S. and Sevostianov I. Effective thermal expansion coefficient of a sintered glass–eucryptite composite // *J Mater Sci.* 2017. V. 52. P. 11314–11325. DOI:10.1007/s10853-017-1298-9
2. Knyazeva A.G., Kryukova O.N., Lurie S.A., Solyaev Y.O. and Shavnev A.A. Intermediate layer formation between inclusion and matrix during synthesis of unidirectional fibrous composite // *AIP Conference Proceedings. International Conference on Physical Mesomechanics of Multilevel Systems 2014.* V. 1623. P. 263-266. DOI: 10.1063/1.4898932
3. Wagner C. Z. Beitrag zur theorie des anlaufvorgangs // *Phys.Chem.* 1933. V. 21. P.25-36
4. Dybkov V.I. 2013. Solid state reaction kinetics / IPMS publications, Kyiv, 2013. – 400 P. ISBN 978-966-02-6762-6
5. Ковалев, О. Б., Беляев, В. В. Математическое моделирование металлохимических реакций в двухкомпонентной реагирующей дисперсной смеси // *Физика горения и взрыва.* 2013. т. 49, № 5, с. 64–76.

DOI: 10.17223/9785946218412/132

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНФИГУРАЦИОННОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ
АТОМОВ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ Ti-Al-N НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ПОЛУЧАЕМОГО ПОКРЫТИЯ

^{1,2}Дмитриев А.И., ^{1,2}Никонов А.Ю., ^{1,2}Еремеев С.В., ¹Шугуров А.Р.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

Превосходные характеристики покрытий на основе системы Ti-Al-N обеспечили их широкое промышленное применение, что вызывает повышенный интерес к исследованию закономерностей формирования данных покрытий и возможностей дальнейшего улучшения их механических и физических свойств. Известно, что повышенные твердость и износостойкость данных покрытий обусловлены тем, что вследствие высоконеравновесных условий осаждения в них формируется метастабильный пересыщенный твердый раствор $Ti_{1-x}Al_xN$. В неравновесных условиях алюминий частично замещает титан в кристаллической решетке TiN, формируя метастабильную ГЦК структуру. Поскольку Al обладает меньшим ионным радиусом, чем титан, то его введение способствует уменьшению параметра решетки покрытий $Ti_{1-x}Al_xN$, что приводит к упругой дисторсии кристаллической решетки и, как следствие, к твердорастворному упрочнению материала покрытия [1]. Дополнительного повышения твердости покрытий $Ti_{1-x}Al_xN$ можно добиться путем их отжига в инертной атмосфере или в вакууме в диапазоне температур от 700 до 950 °C [2]. Однако при температурах отжига свыше 900-950 °C метастабильные домены c-AlN с ГЦК структурой трансформируются в стабильную фазу w-AlN (вюрцит), которая характеризуется ГПУ структурой, что вызывает резкое снижение твердости и износостойкости покрытий $Ti_{1-x}Al_xN$. Дальнейшее развитие технологий обработки материалов требует повышения рабочих температур износостойких защитных покрытий до 1000 °C и выше. Поэтому в последнее время ведутся интенсивные исследования, направленные на поиск способов улучшения характеристик покрытий на основе системы Ti-Al-N.

В настоящей работе с использованием методов расчетов из первых принципов и молекулярной динамики проведено исследование механических свойств покрытий на основе системы Ti-Al-N, в которой варьируется расположение атомов Al в решетке TiN. Проведены расчеты полных энергий и энтальпий смешения твердых растворов $Ti_{1-x}Al_xN$ в зависимости от концентрации x и конфигурационного упорядочения атомов алюминия в рамках теории функционала электронной плотности. На основе полученных результатов построены молекулярно-динамические модели покрытий с различным конфигурационным упорядочением атомов алюминия и проведены расчеты по одноосному растяжению кристаллитов титана с нанесенными покрытиями различного типа и толщины. Проанализировано влияние типа конфигурационного упорядочения атомов алюминия в решетке TiN на прочностные свойства и характер разрушения получаемого покрытия. Результаты компьютерного моделирования сопоставляются с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что наилучшие прочностные характеристики демонстрирует покрытие на основе системы Ti-Al-N со случайным распределением атомов алюминия в кристаллической решетке TiN.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Гранта РФФ № 18-19-00589.

1. O. Knotek, F. Löffler, G. Kramer Multicomponent and multilayer physically vapor deposited coatings for cutting tools // Surface and Coating Technology – 1992. – V. 54-55. – P. 241-248.
2. M. Stueber, H. Holleck, H. Leiste, K. Seeman, S. Ulrich, C. Ziebert Concepts for the design of advanced nanoscale PVD multilayer protective thin films // Journal of Alloys and Compounds – 2009. – V. 483. – P. 321-333.

DOI: 10.17223/9785946218412/133

МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ
ПОЛИФЕНИЛЕНСУЛЬФИДА

^{1,4}Панин С.В., ^{1,2}Гришаева Н.Ю., ^{1,2}Бочкарева С.А., ^{1,2,3}Люкшин Б.А., ^{2,3}Панов И.Л.,
³Мухортин Е.И., ⁴Нгуен Дык Ань

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск,*

²*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск*

³*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

⁴*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

В работе средствами экспериментальной и вычислительной механики исследуются механические и триботехнические свойства наполненных композиций на основе матрицы из полифениленсульфида (ПФС).

ПФС стандартных марок характеризуется высокой ударпрочностью, устойчивостью к воздействию щелочей, кислот и других агрессивных сред, способностью функционировать в диапазоне температур от -60 до +220 °С, хорошими электроизоляционными свойствами при различной влажности и во всем диапазоне температур эксплуатации.

Несмотря на столь внушительные характеристики этих полимеров, продолжают исследования по модификации их свойств. Наиболее распространенным способом модификации является использование наполнителей, меняющих структуру материала без изменения химической природы матриц. Например, наполнение полифениленсульфида углеродом позволяет получить материал с электропроводящими свойствами при одновременном улучшении его теплопроводности, износостойкости и сохранении жесткости.

В работе представлены результаты экспериментальных исследований механических и триботехнических свойств, а также предлагаются модели, позволяющие прогнозировать эффективные деформационно-прочностные свойства композиций на основе ПФС.

Экспериментально исследовались композиции на основе ПФС при наполнении углеродом разной длины. Результаты экспериментов позволяют определить количество добавок, которое в максимальной мере повышает износостойкость материалов в трибосопряжениях.

Прогнозирование деформационно-прочностных свойств проводится на основе анализа представительного объема материала, когда в расчетной области явным образом учитывается наличие частиц включений. Когда размеры армирующих частиц отличаются на порядки, используется следующий прием [1]. Наличие включений наименьших размеров учитывается при определении эффективных свойств соответствующего объема матрицы. Далее эти свойства используются при расчете материала с включениями больших размеров. Этот прием может быть применен неоднократно, если в материале использован широкий спектр наполнителей по размерам.

Проведенное сопоставление экспериментальных и расчетных значений эффективных механических характеристик показывает степень адекватности предложенных и реализованных моделей наполненных композиций.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке: 1) ПФИ ГАН на 2013-2020 годы по направлению фундаментальных исследований 23. [Регистрационный номер НИОКР АААА-А16-116122010041-9]; 2) РФФИ №18-58-00037_бел_a.

1. Дисперсно-наполненные полимерные композиты технического и медицинского назначения / Люкшин Б.А., Шилько С.В., Панин С.В. и др. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2017. – 311 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/134

**ВЛИЯНИЕ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НА ОСОБЕННОСТИ ПЛАСТИЧЕСКОГО
ОТТЕСНЕНИЯ МАТЕРИАЛА В КРИСТАЛЛИТАХ ТИТАНА ПРИ СКРЕТЧ
ТЕСТИРОВАНИИ**

^{1,2}Дмитриев А.И., ^{1,2}Никонов А.Ю., ¹Шугуров А.Р.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

Царапание покрытий индентором является эффективным способом изучения закономерностей их абразивного изнашивания, поскольку механизмы деформации и разрушения покрытий при скретч-тестировании и при абразивном износе носят аналогичный характер. Как показывает анализ опубликованных экспериментальных исследований, посвященных скретч-тестированию поликристаллических твердых тел, основное внимание на сегодняшний день уделяется изучению пластического оттеснения материала движущимся индентором, оценке твердости, определению коэффициента трения и других характеристик образцов. В то же время влияние микроструктуры материалов на их износостойкость, по-прежнему, остается недостаточно исследованным. В настоящей работе с использованием метода молекулярной динамики изучается процесс зарождения и развития пластической деформации при моделировании тангенциального движения жесткого индентора в наноразмерном титановом поликристалле. Проанализированы особенности пластического оттеснения материала при прохождении индентора через межзеренные границы и плоскости двойников. В отличие от предыдущих исследований [1], основное внимание в настоящей работе уделено закономерностям взаимодействия индентора с границами двойников когерентного и некогерентного типа. Показано, что при нагружении двойника, с когерентными границами наблюдается значительное их искривление, вызванное деформационным воздействием. В то же время после снятия нагрузки такие границы принимают пространственную конфигурацию близкую к исходной. Искривление плоскости границ двойников некогерентного типа при прохождении индентора менее интенсивно, однако, после прохождения индентора, такие границы остаются деформированными. Результаты исследований показывают хорошее качественное, а в отношении некоторых характеристик и количественное соответствие результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными по скретч-тестированию поликристаллических титановых образцов.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 18-48-700009.

1. A.I. Dmitriev, A.Yu. Nikonov, A.R. Shugurov, A.V. Panin Numerical study of atomic scale deformation mechanisms of Ti grains with different crystallographic orientation subjected to scratch testing // Applied Surface Science – 2019. – V. 471. – P. 318-327.

DOI: 10.17223/9785946218412/135

**ПОСТРОЕНИЕ ФУНКЦИЙ ОТКЛИКА ДЛЯ МЕЗОМАСШТАБНЫХ ЧАСТИЦ CU, FE
И С НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

^{1,2}Никонов А.Ю., ^{1,2}Дмитриев А.И.

¹*Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Одной из ключевых проблем методов моделирования на мезо и макро масштабах является выбор параметров, описывающих взаимодействие между отдельными элементами среды. Эффективным способом решения этой проблемы может быть использование методов моделирования атомного уровня. В настоящей работе с целью определения параметров взаимодействия частиц мезомасштабного уровня методом молекулярной динамики были исследованы основные закономерности развития процесса пластического деформирования материалов с тремя различными типами кристаллической структуры. Моделировались кристаллиты в условиях сдвига, а так же одноосного сжатия и растяжения. Получаемые при этом зависимости напряжения от приложенной деформации были использованы в качестве входных параметров для метода подвижных клеточных автоматов. Исследовались исходно бездефектные кристаллиты меди, альфа-железа и углерода, которые представляют три типа кристаллической решётки: ГЦК, ОЦК и гексагональной кристаллической. Для проведения молекулярно-динамических расчётов использовался программный пакет LAMMPS[1]. Визуализация и анализ атомной структуры моделируемых образцов проводились в программе OVITO [2]. Расчёты были проведены для различных ориентаций кристаллических решёток относительно направления нагружения. Анализировалась перестройка атомной структуры в процессе пластической деформации, а также рассчитывались диаграммы нагружения.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 гг. (Проект Ш.23.2.4).

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. Vol. 117. No. 1. P. 1–19.
2. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol. 18. No. 1. P. 15012.

DOI: 10.17223/9785946218412/136

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СРЕДЫ НА
РАСПРОСТРАНЕНИЕ МЕДЛЕННЫХ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ФРОНТОВ**

^{1,2}Микушина В.А., ^{1,2}Смолин И.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

²*Томский государственный университет, Томск, Россия*

Авторами работ [1–3] предложены и численно реализованы два варианта математической модели, описывающей процесс генерации и распространения медленных деформационных волн в упругопластической среде. В случае реализации первого подхода каждая расчетная ячейка является бистабильным клеточным автоматом, находящимся либо в упругом, либо в пластическом состоянии. Алгоритм решения задач при таком подходе подробно изложен в работе [1]. При реализации второго подхода использовалась идея мгновенной релаксации и снесения напряжений на заданную σ – ϵ диаграмму. Такая диаграмма включает линейное разупрочнение, площадку текучести и последующее нелинейное упрочнение [2, 3]. В расчетах варьировались величины зуба текучести, площадки текучести и закон упрочнения за площадкой текучести. В зависимости от их комбинаций изменялась как амплитуда медленной деформационной волны, так и ее скорость [2].

Показано, что при взаимодействии медленные деформационные возмущения проявляют свойства солитонов, причём подобные решения демонстрируют уравнения механики деформируемого твердого тела при соответствующей постановке динамической задачи [3]. Развитие этой концепции и соответствующих математических моделей предлагается в данной работе. Предложено использовать N-образную σ – ϵ диаграмму в качестве локального закона разупрочнения – упрочнения. Целью исследования является подробное систематическое изучение влияния определяющих факторов этой модели на скорости распространения автоволн (медленных деформационных фронтов).

Произведено численное изучение возможности генерации медленных деформационных автоволн как результата локальной потери устойчивости исследуемой нагружаемой упругопластической среды при малых динамических воздействиях. Численно исследованы особенности распространения медленных деформационных волн неупругой природы в среде описанной реологии, включая установление зависимости скоростей их распространения от условий генерации и реологических свойств среды. Также численно изучены условия и механизмы генерации в упругопластической среде медленных деформационных автоволновых возмущений в результате потери устойчивости в локальных областях нагруженной (т.е. активной) упругопластической среды.

Данное исследование выполнено в рамках проекта РНФ № 19-17-00122.

1. Makarov P.V., Peryshkin A.Y. Slow motions as inelastic strain autowaves in ductile and brittle media // Physical mesomechanics. 2017. V.20. No 2. P. 209–221.
2. Макаров П.В., Перишкин А.Ю. Солитоноподобный характер медленных волн деформации в нагруженной среде // Деформирование и разрушение материалов с дефектами и динамические явления в горных породах и выработках: Материалы XXVII Международной научной школы им. академика С.А. Христиановича. Симферополь: Таврический национальный университет, 2017. С. 153–157
3. Макаров П.В., Хон Ю.А., Перишкин А.Ю. Медленные деформационные фронты. Модель и особенности распространения // Геодинамика и тектонофизика. 2018. Т. 9. № 3. С. 755–769.

DOI: 10.17223/9785946218412/137

СВЯЗАННАЯ МОДЕЛЬ СИНТЕЗА КОМПОЗИТА В РЕЖИМЕ ГОРЕНИЯ

Чумаков Ю.А., Князева А.Г.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия, Томск
chya@ispms.ru*

Физические явления, приводящие к формированию гетерогенной структуры материалов в процессе их синтеза, характеризуются разными пространственными и временными масштабами, однако оказывают влияние друга. Это относится и ко взаимовлиянию процессов деформирования, теплопереноса и химических реакций, а также к взаимодействию процессов на уровне отдельных частиц порошковых прессовок и процессов в прессовке в целом при высокотемпературном синтезе композиционных материалов.

В настоящей работе предлагается связанная модель процесса синтеза композита в режиме горения. Предполагается, что химические превращения, протекающие в смеси при достижении температуры плавления легкоплавкого компонента могут быть описаны двумя суммарными реакциями, одна из которых приводит к формированию материала упрочняющих частиц, вторая – к формированию матрицы. Подобная схема приемлема, например, при описании синтеза композитов из смесей Ti-Al-C; Ti-Al-B; Ti-Al-Fe₂O₃; Al-Fe₂O₃-Fe-Cr-Ni; Ti-Fe₂O₃-Nb и др. Аналогичные «упрощения» использованы и в классических работах по теории горения и взрыва [1,2]. Пример модели синтеза в режиме теплового взрыва с двумя суммарными реакциями содержится в [3]

Связанная математическая модель, предложенная в настоящей работе, включает уравнение теплопроводности, связанное с деформациями; систему двух уравнений химической кинетики; уравнения равновесия и реологические соотношения для вязкоупругого тела, в которых учитываются напряжения и деформации как термические, так и вызванные изменением состава (т.е., химические). Химические реакции принципиально могут протекать как в твердой, так и в жидкой фазах. Однако при участии твердых веществ реакции тормозятся либо диффузией через слой твердого реагента, либо диффузией через слой образовавшегося продукта. В макроскопических моделях это учитывается с помощью введения специальных кинетических функций, отражающих механизм реакции на микроуровне, а также за счет особого описания теплоемкости, изменяющейся в окрестности температуры плавления. При достижении температуры плавления изменяются и реологические свойства. Поскольку структура композита в любой момент времени не известна, то в модели использованы эффективные свойства, зависящие от доли реагентов и продуктов реакции, а также от пористости. Для оценки эффективных свойств использовали подходы, предложенные в теории спекания и механики композитов. Изменение пористости порошковой прессовки под действием внешнего нагружения также описывается кинетическим уравнением. Модель замыкают граничные и начальные условия: в начальный момент времени температура реагентов равна температуре окружающей среды, состав реакционной смеси задан, инициирование реакции осуществляется искрой, нагружение происходит в направлении распространения фронта реакции.

Задача решена численно. Расчеты содержат информацию о режимах распространения реакции, эволюции состава и свойств в процессе синтеза, а также о распределении компонент тензоров напряжений и деформаций.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020, проект № 23.2.3

1. Некрасов Е.А., Тимохин А.М. К теории теплового распространения волн многостадийных реакций, описываемых простыми брутто-схемами // ФГВ – 1986. – №4. – С.48–55
2. Боровиков М.Б., Гольдшлегер У.И. Об особенностях развития теплового взрыва при протекании последовательных реакций с эндотермической стадией // ФГВ– 1981. – №5. – С.106–112
3. Travitzky N., Fu Z., Knyazeva A., Janssen R., Nekludov D., Yin X., Greil P. Reactive Synthesis of Ceramic-Metal Composites // *Advanced Engineering Materials.* – 2018. – V. 20. – No 8. – 1800324

DOI: 10.17223/9785946218412/138

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ФАКТОРОВ, КОНТРОЛИРУЮЩИХ РЕЖИМ
АДГЕЗИОННОГО ИЗНОСА, МЕТОДОМ ДИСКРЕТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ**

¹Дудкин И.В., ¹Шилько Е.В., ^{1,2}Попов В.Л.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Technische Universitat Berlin, Berlin, Germany*

Адгезионный износ является сложным, многомасштабным и до сих пор плохо изученным явлением [1-2]. Со времени высокоцитируемой публикации Рабиновича в 1958 году [3] известно, что режим адгезионного износа контролируется соотношением параметров материала, включая модуль упругости, твердость и удельную поверхностную энергию. В недавних работах научных групп J.-F. Molinari и L. Pastewka [4] было показано, что эволюция адгезионного износа может развиваться двумя принципиальными путями: 1) образование и рост частиц износа или 2) пластическая деформация микроконтактов, сопровождающаяся сглаживанием неровностей. Однако в указанных работах рассматривались шероховатости наноскопического масштаба. Поэтому актуальным является понять, насколько универсальны и независимы от параметров взаимодействия режимы износа, впервые формализованные Рабиновичем и подтвержденные численно в работах научных групп J.-F. Molinari и L. Pastewka. Сказанное обосновывает необходимость детального теоретического анализа условий, определяющих реализацию определенного режима износа микромасштабных и мезомасштабных шероховатостей в условиях тангенциального контакта поверхностей. Такое исследование должно осуществляться не на атомистическом, но более высоком масштабном уровне, позволяющем исследовать роль «макроскопических» материальных параметров.

В настоящей работе мы предприняли попытку исследовать детали процесса адгезионного износа в рамках метода дискретных элементов с явным учетом сил адгезии, действующих между поверхностями контактирующих тел. Рассматривалась модельная система, представляющая собой участок зоны контакта двух тел с контактирующими уединенными шероховатостями. Шероховатости полагались имеющими трапециевидную форму. Моделировались условия тангенциального контакта поверхностей. Вертикальное положение верхней и нижней поверхностей модельной системы полагалось фиксированным. По горизонтальной оси к этим поверхностям прикладывались постоянные скорости в противоположных направлениях. Использовались периодические граничные условия по горизонтальной оси.

В рамках применяемой модели упругопластического механического поведения материалов полагается, что до достижения предела текучести механический отклик дискретных элементов описывается моделью Кельвина, за пределами упругости дополнительно к этому протекают процессы релаксации, которые описываются на основе ассоциированной бездилатансионной модели пластического течения с критерием пластичности Мизеса [5]. Потеря сцепления происходит при достижении заданным силовым критерием в паре связанных дискретных элементов некоторого порогового значения. В работе в качестве этого критерия применялся двухпараметрический критерий Друккера-Прагера [5]. Адгезионное взаимодействие несвязанных элементов описывалось на основе модели Дагдейла когезионной зоны, использующей приближение постоянной величины адгезионного напряжения σ_0 , действующего в пределах расстояния δ между поверхностями элементов.

Результаты моделирования показали, что в зависимости от величины адгезионного напряжения σ_0 и значений механических параметров материала поверхностных слоев в результате взаимодействия шероховатостей реализуется один из трех типичных видов разрушения шероховатостей: «Вырывание», «Стачивание» или «Скол».

Для каждой комбинации механических параметров материала определялось свое пороговое значение адгезионного напряжения Дагдейла (σ_0^*), отвечающее смене режима разрушения шероховатости от «вырывания» к «стачиванию». При $\sigma_0 = \sigma_0^*$ размер

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

рассматриваемой шероховатости является критическим, то есть отвечающим границе между режимами адгезионного износа.

В рамках общей формулировки критерия Друкера-Прагера одному значению прочности материала на сдвиг (σ_j) могут соответствовать различные соотношения значений прочности материала на сжатие (σ_c) и отрыв (σ_t). Поэтому в работе анализировалась зависимость критического значения адгезионного напряжения σ_0^* от величины отношения σ_c/σ_t при сохранении постоянного значения σ_j . Результаты этого исследования графически показаны на рисунке 1. Можно видеть, в частности, что критическое значение адгезионного напряжения является убывающей функцией параметра $a = \sigma_c/\sigma_t$. В первом приближении эту зависимость можно рассматривать как линейную. Более того, в области $a > 2,3$ смена режима разрушения шероховатости не наблюдается.

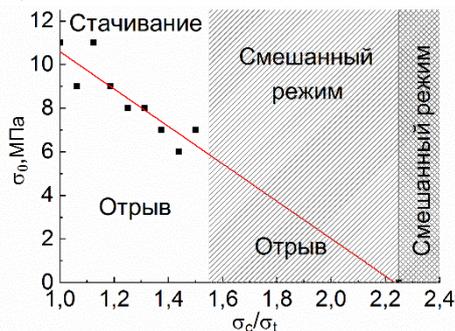


Рис. 1. График зависимости критической адгезионной прочности σ_0^* от параметра a критерия Друкера-Прагера.

Аналитические оценки Рабиновича дают достоверный результат только для «высокопластичных» материалов, неупругое поведение которых обусловлено движением трансляционных дефектов. Динамика этих дефектов, а следовательно, и величина сдвиговой прочности материала достаточно слабо зависят от величины гидростатического давления ($a \sim 1$). В то же время для хрупких материалов или для материалов с высокой исходной дефектностью нормальное давление в силу различных причин вносит ощутимый вклад в разрушение материала, что влияет на изменение границы между режимами стачивания. Следовательно, в аналитическую оценку Рабиновича должна входить не просто сдвиговая прочность в условиях чистого сдвига σ_j , но комбинация сдвиговой прочности и некоторого коэффициента влияния гидростатического давления.

1. S. Wen, P. Huang. Principles of Tribology, 2nd ed. Wiley, 2017. 608 p. ISBN: 978-1-119-21491-5
2. E. Rabinowicz. Friction and Wear of Materials. Wiley, 1995. 336 p. ISBN: 978-0471830849
3. E. Rabinowicz. The effect of size on the looseness of wear fragments // Wear. 1958. V. 2, P. 4–8.
4. R. Aghababaei, D.H. Warner, J.-F. Molinari. Critical length scale controls adhesive wear mechanisms // Nat. Commun. 2016. V. 7. P. 11816. DOI: 10.1038/ncomms11816
5. E.V. Shilko, S.G. Psakhie, S. Schmauder, V.L. Popov, S.V. Astafurov, A.Yu. Smolin. Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure // Comp. Mater. Sci. 2015. V. 102. P. 267-285. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.02.026.

DOI: 10.17223/9785946218412/139

**МАСШТАБНЫЙ ФАКТОР И ЕГО РОЛЬ В ПРОЦЕССЕ РОСТА ТРЕЩИНЫ
ПРОДОЛЬНОГО СДВИГА В ХРУПКИХ МАТЕРИАЛАХ**

¹Григорьев А.С., ^{1,2}Шилько Е.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет*

Одним из ключевых следствий базовых принципов кинетической теории прочности является прямая связь между пространственным масштабом разрушения и временем инкубации разрушения. При этом дискуссионным остается вопрос о виде данной зависимости. Анализ экспериментальных данных свидетельствует об общности динамики разрушения хрупких материалов на различных пространственных масштабах. В частности, классические теоретические модели хрупкого разрушения предполагают масштабно-инвариантный характер распространения трещин в установившемся режиме. Также хорошо известно, что типичные значения скорости роста трещин отрыва и продольного сдвига составляют десятки доли скорости волны Рэлея в материале, и эти характерные значения почти не зависят от пространственного масштаба разрушения. Все сказанное свидетельствует о том, что временной масштаб времени инкубации локального разрушения должен быть связан с масштабом пространственной протяженности трещин зависимостью, близкой к линейной. Тем не менее, до сих пор не проводилось детального исследования влияния масштаба времени локального разрушения на динамику роста трещин в хрупких материалах. Экспериментальное исследование данного вопроса является крайне затруднительным. В настоящей работе такое исследование проведено путем компьютерного моделирования методом подвижных клеточных автоматов. Использовалась модель разрушения, учитывающая конечное время инкубации разрушения.

В работе исследовался процесс распространения трещины продольного сдвига в образце модельного упруго-хрупкого материала, упругие характеристики и плотность которого отвечали характерным значениям для консолидированных песчаников. Изучался вопрос влияния масштабного фактора на динамику роста трещины. В проведенных исследованиях рассматривались образцы, характерные линейные размеры которых варьировались в пределах двух порядков величины от «макроскопического» до «мезоскопического» (образцы разного масштаба были подобны друг другу).

Результаты моделирования показали, что линейная связь между пространственным масштабом разрушения и временным масштабом этого процесса является необходимым условием инвариантности процесса разрушения материала в рассматриваемом интервале масштабов. Структурным уровнем разрушения можно считать интервал пространственных масштабов, в котором зависимость между протяженностью трещины и временем ее формирования (инкубации) является линейной. Различные структурные уровни разрушения характеризуются различными значениями коэффициента пропорциональности. Различия значений коэффициентов пропорциональности, очевидно, связаны с особенностями внутренней структуры (поры, включения других фаз, внутренние границы раздела и т.д.) на различных структурных уровнях, которые оказывают определяющее влияние на рост трещины соответствующего масштаба.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы (Приоритетное направление III.23).

DOI: 10.17223/9785946218412/140

СЕЛЕКТИВНАЯ ФИЛЬТРАЦИЯ ВОДЫ С ПРИМЕСНЫМИ ИОНАМИ ЧЕРЕЗ ПРЯМОУГОЛЬНЫЕ НАНОПОРЫ ПЕРСПЕКТИВНЫХ НАНОМЕМБРАН

Цуканов А.А., Шилько Е.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Недавние исследования влияния геометрии пор на их проницаемость и селективность показали, что мембраны с щелевидными порами способны обеспечить более высокую эффективность и селективность при заданной величине проницаемости, чем мембраны с цилиндрическими порами [1]. Щелевидная геометрия поры является предельным случаем прямоугольной с большим соотношением длин сторон. Примером материала с прямоугольными нанопорами является синтезированный кристаллический 2D-сопряженный ароматический полимер (2D-CAP) со структурой подобной пористому графену [2]. Такой материал, согласно численным оценкам, характеризуется 100% задержкой ионов Na и Cl и высокой водопроводимостью $1172 \text{ л}/(\text{м}^2 \times \text{ч} \times \text{бар})$ [3], что превосходит параметры существующих коммерческих мембран и теоретические оценки характеристик других перспективных мембран [4]. Таким образом, разработка нанопористых материалов с порами прямоугольного сечения представляется перспективной для создания эффективных мембран опреснения воды, а также разделения ионов [5]. При этом в качестве основы перспективны наноматериалы, имеющие двумерную структуру, как нанолисты графена, нитрида бора, карбида бора, борофен, двумерные дихалькогениды переходных металлов, фосфорен и др.

Структура гидратной оболочки иона на интерфейсе с наноструктурированным материалом определяет селективность и проницаемость нанопористого материала. Электростатическое взаимодействие со стенкой или периметром нанопоры является дополнительным фактором, контролирующим селективность поры по отношению к анионам и катионам (см. например, [6]). Благодаря естественной полярности атомной пары бор-азот, нанолист гексагонального нитрида бора (BNNS) был выбран в качестве основы нанопористой мембраны для исследований в настоящей работе.

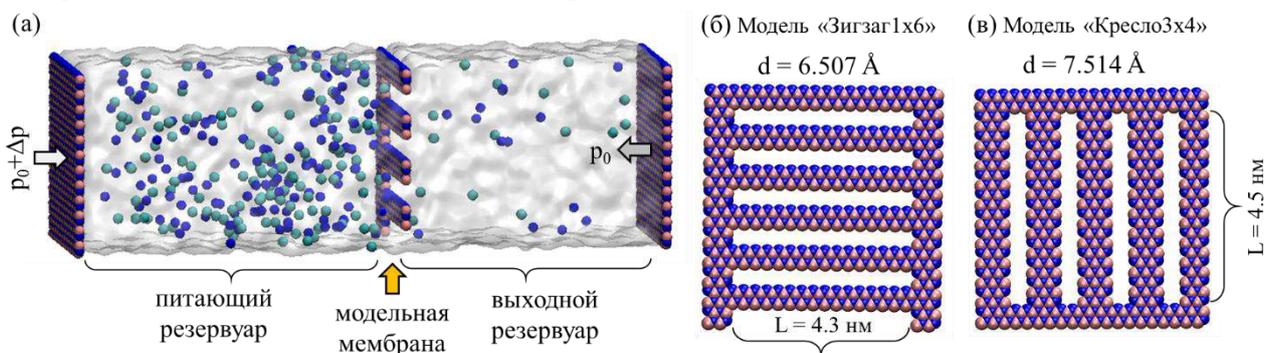


Рис. 1. Постановка численных экспериментов: (а) – общий вид расчетной области. Крайние нанолисты выполняют роль поршней для поддержания давления и его градиента, средний нанолист (указан желтой стрелкой) выполняет роль фильтрационной мембраны; (б), (в) – две из восьми рассмотренных мембран h-BN. Названия для моделей «зигзаг» и «кресло» выбраны согласно принятой терминологии для нанотрубок разной хиральности. Числа указывают номер модели и количество пор на расчетную ячейку. Обозначения: В–розовый, N–синий (нанолист), Cl–сине-зеленый, Na–синий (свободный), вода показана прозрачной поверхностью.

Постановка численных экспериментов представлена на Рис.1а. Химическое строение BNNS позволяет формировать поры с разным составом периметра из атомов B_n , N_n или B_nN_n , при этом за счет разницы в электроотрицательностях атомов, бор имеет положительный парциальный заряд, азот – отрицательный. Прямоугольные нанопоры типа «зигзаг» (Рис.1б) по длинной стороне периметра имеют с одной стороны только атомы бора, с противоположной – атомы азота. Таким образом, одна сторона (В) имеет локальный положительный заряд,

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

вторая (N) – отрицательный. Обе длинные стороны нанопор типа «кресло» образованы дипольными парами -B-N- (Рис 1в). Названия для моделей «зигзаг» и «кресло» выбраны согласно принятой терминологии для нанотрубок разной хиральности (“zigzag”, “armchair”), различие заключается лишь в том, что тип нанотрубки определяется по структуре торца, в то время как для прямоугольной нанопоры более естественно определять тип по структуре ее длинной стороны.

С использованием полноатомной неравновесной молекулярной динамики (NEMD) были получены оценки водопроводимости и процента задержки ионов Na и Cl для 8 модельных h-VN мембран с прямоугольными порами различной ширины. Модельные мембраны «зигзаг1x6» и «кресло3x4» задерживают 100% ионов хлора, при этом нанопора типа «зигзаг», несмотря на меньшую ширину, пропускает ионы Na⁺. Мембрана «кресло3x4» демонстрирует 100% задержку натрия. Водопроницаемость как отдельной нанопоры, так и мембраны выше в случае мембраны «кресло3x4» по сравнению с «зигзаг1x6». Расчеты фильтрации через две мембраны с узкими нанопорами типа «кресло» шириной 5.010 Å и 6.262 Å свидетельствуют о непроницаемости таких мембран (при разности давлений 50 МПа). Согласно результатам расчетов для мембран с широкими нанопорами (шириной 8.676 Å и 10.845 Å типа «зигзаг» и 10.018 Å типа «кресло»), они характеризуются более низкими селективностью и показателями задержки ионов. Тем не менее, узкие прямоугольные нанопоры остаются интересными для задач газоразделения, в то время как широкие перспективны и для задач опреснения и разделения ионов, но после функционализации их периметра определенными химическими группами, что является предметом дальнейших исследований.

Наибольшую эффективность «проницаемость-селективность» демонстрирует модельная мембрана «кресло3x4» с нанопорами шириной 7.514 Å, 100% задержкой ионов Na⁺ и Cl⁻ и водопроводимостью ~642 л/(м²×ч×бар). Таким образом, она занимает место рядом с модельной мембраной на основе пористого однослойного нанолита дисульфида молибдена MoS₂ [4], уступая в 1.8 раза по водопроводимости двухслойной 2D-CAP мембране [3].

Численное моделирование выполнено с использованием LAMMPS [7] на суперкомпьютере «Ломоносов-2» НИФЦ МГУ им. М.В. Ломоносова [8].

1. Kanani D. M. et al. Permeability–selectivity analysis for ultrafiltration: Effect of pore geometry // *Journal of membrane science*. 2010. Т. 349. №. 1-2. С. 405-410.
2. Liu W. et al. A two-dimensional conjugated aromatic polymer via C–C coupling reaction // *Nature chemistry*. 2017. Т. 9. №. 6. С. 563.
3. Yan Y. G. et al. A graphene-like membrane with an ultrahigh water flux for desalination // *Nanoscale*. 2017. Т. 9. №. 47. С. 18951-18958.
4. Heiranian M., Farimani A. B., Aluru N. R. Water desalination with a single-layer MoS₂ nanopore // *Nature communications*. 2015. Т. 6. С. 8616.
5. Цуканов А. А., Шилько Е. В., Гутманас Э., Псахье С. Г. Избирательная фильтрация жидкостей в материалах с щелевидными нанопорами // *Физическая мезомеханика*. 2018. Т. 21. №. 5. С. 16-22.
6. Tsukanov A. A., Psakhie S. G. Nanopore wall-liquid interaction under scope of molecular dynamics study // *AIP Conference Proceedings*. AIP Publishing. 2017. Т. 1909. №. 1. С. 020222.
7. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *Journal of computational physics*. 1995. Т. 117. №. 1. С. 1-19.
8. Sadovnichy V.A., Tikhonravov A., Voevodin V.I., Opanasenko V. "Lomonosov": Supercomputing at Moscow State University // *Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale*. Chapman and Hall/CRC. 2013. С. 283-308.

DOI: 10.17223/9785946218412/141

**ОСОБЕННОСТИ ПЕРЕСТРОЙКИ ПРИ ПОВЕРХНОСТНОЙ СТРУКТУРЕ
ПОЛИКРИСТАЛЛА МЕДИ НА АТОМНОМ МАСШТАБЕ ПРИ ЛОКАЛЬНОМ
ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ**

^{1,2}Никонов А.Ю., ^{1,2}Жармухамбетова А.М.

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Современная промышленность очень требовательна к характеристикам материалов, применяемых в производстве. Существует множество способов модификации свойств материалов для получения необходимых параметров (легирование, закалка, отжиг, равноканальное угловое прессование и др.). Однако в большинстве случаев достаточно изменять свойства материала только вблизи поверхностного слоя, поскольку он испытывает основные нагрузки. Такая процедура является менее трудозатратной и активно используется в промышленности. Поэтому вопросу изучения физико-механических свойств поверхности и улучшению её характеристик путём применения различных способов обработки уделяется пристальное внимание. Несмотря на постоянное совершенствование методов экспериментального изучения, особенности эволюции структуры, при которых происходят эти изменения, по-прежнему остаются малоизученными. Эффективным решением этой проблемы, прослеживаемым в современной литературе, является применение, в сочетании с экспериментом, различных методов численного моделирования. Метод молекулярной динамики для большинства задач атомного масштаба, по-прежнему, остаётся основным инструментом теоретического описания поведения моделируемой системы. Он позволяет изучать эволюцию атомной подсистемы в условиях динамического нагружения с явным заданием внутренней структуры поликристаллического материала. Таким образом, целью работы было изучение с применением метода молекулярной динамики особенностей зарождения и развития структурных дефектов в поликристаллическом материале в условиях локализованного поверхностного пластического деформирования.

Молекулярно-динамические расчёты проводились с использованием программного пакета LAMMPS[1]. В качестве объекта исследования был выбран фрагмент поликристалла меди, исходно состоящий из четырёх зёрен, разделённых плоскими дефектами типа большеугловой симметричной границы $\Sigma=5$ (210)[001]. Локализованное сдвиговое нагружение реализовывалось путём моделирования контакта поверхности микровыступа с контртелом, в качестве которого выступал абсолютно жёсткий индентор. Рассматривалось 2 варианта ориентации кристаллической решётки зёрен. Для анализа изменений в структуре моделируемого поликристалла примельась программа OVITO [2].

Результаты компьютерного моделирования на масштабе отдельных атомов позволили выявить механизмы пластического деформирования материала с внутренней структурой в условиях локального сдвигового нагружения. Согласно результатам анализа структуры этот процесс происходит путём формирования частичных дислокаций Шокли, которые возникают вблизи области контакта образца с индентором и распространяются вглубь поликристалла. Это приводит к формированию системы многочисленных пересекающихся плоских дефектов – дефектов упаковки. Кроме того, было обнаружено ранее [3], в результате локального сдвигового нагружения происходит перемещение границ зёрен в объёме образца. Движение и взаимодействие границ зёрен, в свою очередь, может приводить к рекристаллизации приповерхностного слоя материала.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации № МК-3640.2019.2.

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. Vol. 117. No. 1. P. 1–19.
2. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol. 18. No. 1. P. 15012.
3. Дмитриев А.И., Никонов А.Ю., Скоробогатов А.С., Кузнецов В.П., Колубаев Е.А. Моделирование поведения кристаллита с межзеренной границей в условиях локального сдвигового нагружения // Современные проблемы науки и образования. 2014. № 6.; URL: <http://www.science-education.ru/ru/article/view?id=15953> (дата обращения: 20.06.2019).

DOI: 10.17223/9785946218412/142

**ЛОКАЛИЗАЦИЯ ДЕФОРМАЦИИ И ФОРМИРОВАНИЕ ОСТАТОЧНЫХ
НАПРЯЖЕНИЙ В МЕТАЛЛОКЕРАМИЧЕСКИХ КОМПОЗИТАХ И ПОКРЫТИЯХ**

Балохонов Р.Р., Романова В.А., Бакеев Р.А., Кульков А.С., Кульков С.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Исследованы процессы локализации пластических деформаций в металлокерамических композитах и покрытиях при механическом нагружении и формирования остаточных напряжений в условиях охлаждения из расплава до комнатной температуры. Двумерные и трехмерные краевые задачи решались численно методами конечных разностей [1] и конечных элементов [2]. Структура композитов учитывает сложную форму включений в явном виде (Рис.1). Использовались изотропные модели упругопластической алюминиевой матрицы и упругих керамических включений.

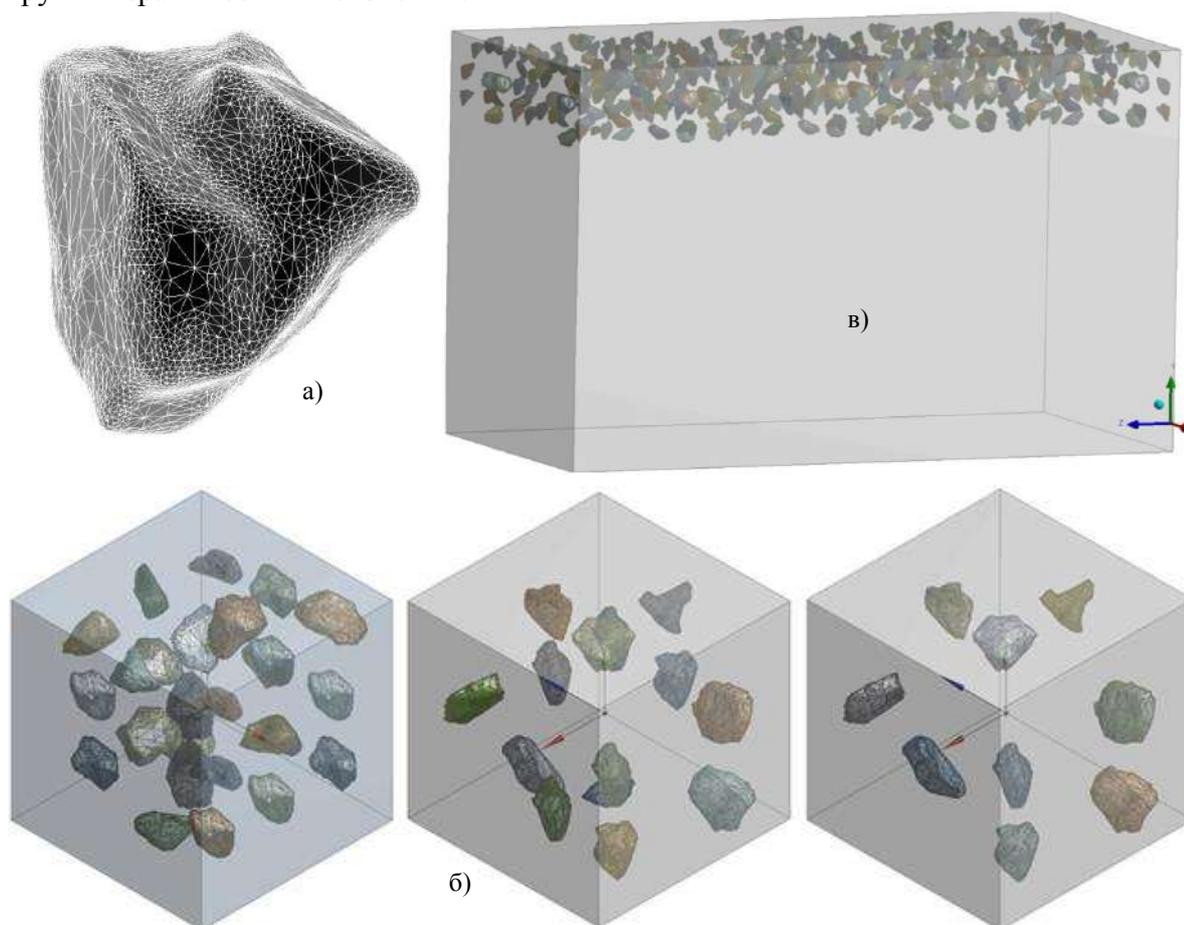


Рис. 1. Трехмерные структуры единичной керамической частицы (а), мезообъема композиционного покрытия с различной объемной долей включений (б) и материала с композитным покрытием (в).

Проведены расчеты деформирования структур с различной объемной долей и средним размером включений без учета остаточных напряжений при сжатии. Исследовано влияние расстояния между керамическими включениями на характер распределения областей объемного растяжения, на величину концентрации напряжений в области границ раздела, на характер разрушения композитов, а также на макроскопическую прочность образцов. Изучены остаточные напряжения, возникающие в металлокерамических композитах и покрытиях при спекании за счет разницы коэффициентов термического расширения. Выявлены места формирования локальных сжимающих и растягивающих напряжений в металлической матрице и керамических включениях в условиях близких к всестороннему сжатию, реализуемых при охлаждении структур с включениями от температуры спекания до

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

комнатной температуры. Проведено сравнение характеристик напряженно-деформированного состояния при всестороннем и одноосном сжатии структуры, исследовано влияние температурной зависимости предела текучести металлической матрицы на локализацию пластической деформации в матрице и концентрацию напряжений во включениях. Исследовано влияние размера и объемной доли включений на величину и характер распределения остаточных напряжений, возникающих после охлаждения структур композитов от температуры близкой к температуре плавления до комнатной температуры. Проведено качественное сравнение результатов численного моделирования с аналогичными результатами, полученными в экспериментах, а также с соответствующими результатами расчетов без учета остаточных напряжений. Сделаны выводы о влиянии вида нагружения: одноосное сжатие и сжатие при охлаждении, которое близко к всестороннему, на величину и характер распределения областей объемного растяжения в нагружаемых композитах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 18-19-00273).

1. R.R. Balokhonov, V.A. Romanova, S.A. Martynov, A.V. Zinoviev, O.S. Zinovieva, E.E. Batukhtina A computational study of the microstructural effect on the deformation and fracture of friction stir welded aluminum. *Computational Materials Science* 116 (2016) 2-10.
2. Smith M. ABAQUS/Standard User's Manual, Version 6.9. Providence, RI: Simulia, 2009.

DOI: 10.17223/9785946218412/143

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ
ПОРИСТЫХ ПЬЕЗОКЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ В УЛЬТРАЗВУКОВЫХ
ИЗЛУЧАТЕЛЯХ**

Наседкин А.В.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

В современной технике широко используются различные ультразвуковые приборы, причем области их применения постоянно расширяются. Для возбуждения и регистрации акустических волн в этих устройствах часто применяются пьезоэлектрические преобразователи. Эффективность пьезоэлектрических актуаторов и сенсоров в таких приложениях зависит от ряда характеристик. Наиболее существенную роль играют свойства пьезокерамического материала и их стабильность. Материальные модели пьезокерамики, геометрические особенности устройства и типы генерируемых волн определяют такие характеристики, как коэффициенты электромеханической связи, акустический импеданс, полосу пропускания и др.

Как показали теоретические и экспериментальные исследования, в акустических приложениях пористые пьезокерамические материалы имеют ряд преимуществ по сравнению с плотными. Так, пористая пьезокерамика имеет меньший импеданс, что обеспечивает лучшее акустическое согласование излучателя с внешней акустической средой. В связи с этим, в пьезоизлучателе можно обойтись без добавления согласующих слоев, что упрощает конструкцию и повышает ее долговечность. Кроме того, для многих видов пористой пьезокерамики толщинный пьезомодуль d_{33} практически не зависит от пористости, а ее коэффициенты пьезочувствительности g_{33} и g_{31} возрастают с ростом пористости. В итоге даже для высокопористой пьезокерамики ее толщинный коэффициент электромеханической связи остается достаточно высоким. Однако поперечный пьезомодуль d_{31} обычной пористой пьезокерамики убывает с ростом пористости, а также понижаются ее прочностные свойства.

Недавно стали разрабатываться новые пористые пьезокерамические материалы, которые обладают улучшенными характеристиками и сохраняют при этом все основные достоинства обычной пористой пьезокерамики. Эти пористые пьезокерамические материалы имеют модифицированные свойства в окрестностях пор, а также, возможно, пористую наноструктуру. Так, использование в порообразователях микро- или наногранул с металлическими частицами или с частицами других веществ позволяет получать пористые материалы с полностью или частично металлизированными или с легированными другими веществами поверхностями пор.

Для наноразмерных пор наблюдается масштабный эффект, в силу которого материальные свойства нанопористого материала могут существенно отличаться от свойств материала с обычной или с микро- пористостью. Наиболее интересен известный и для упругих тел феномен возрастания жесткости нанопористого материала по сравнению с жесткостью сплошного материала при уменьшении размеров нанопор.

Для определения эффективных модулей пористой пьезокерамики использовались теория электроупругости, метод эффективных модулей, конечно-элементные технологии генерирования представительных объемов и решения задач гомогенизации.

Были созданы программы на языке APDL ANSYS, позволяющие в автоматизированном режиме решать в пакете ANSYS задачи гомогенизации пьезоэлектрических композитов различных типов связности и определять их эффективные модули. Для генерации структур представительных объемов, помимо простого случайного алгоритма ANSYS, были использованы также внешние программы, реализующие разнообразные алгоритмы: 3-х алгоритм, поддерживающий связанность материала первой фазы вплоть до 90 % включений второй фазы; 3-0 алгоритм с регулярной структурой связности первой фазы по трем осевым направлениям и с закрытой структурой элементов второй фазы; кластерные алгоритмы (метод Виттена-Сандера, создающий кластерные структуры второй фазы; метод «роста из плоскости»; метод начальной концентрации и др.)

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Конечно-элементный пакет ACELAN-COMPOS, разрабатываемый на кафедре математического моделирования ЮФУ, ориентирован на решение задач гомогенизации со связанностью механических и электромагнитных полей. В этом пакете реализованы новые алгоритмы 3-3 связности, поддерживающие связанность двух фаз; алгоритм 3-0 связности, создающий гранулированные структуры; и алгоритм 3-1 связности, создающий структуры со стержневыми элементами в матрице.

Для всех этих моделей были разработаны алгоритмы автоматизированного поиска конечных элементов, контактирующих с межфазными границами, и размещения на них оболочечных элементов, имитирующих наличие поверхностных эффектов для наноразмерных включений или пор. В случае материала с металлизированными границами пор дополнительно на этих границах задавались краевые условия, принятые в теории электроупругости для свободных электродов.

Была также реализована возможность учета неоднородной поляризации пористой пьезокерамики. Для этого в представительном объеме предварительно решалась задача электростатики, имитирующая процесс поляризации. Из решения данной задачи определялись векторы поляризации, которые запоминались для каждого пьезоэлектрического конечного элемента и определяли элементные системы координат для последующих расчетов в пьезоэлектрических задачах гомогенизации.

В качестве примеров использования пористых пьезокерамик в ультразвуковых преобразователях были исследованы следующие модели:

- сферические излучатели со сплошными [1] и с разрезными [4] электродами, работающие на толщинных модах колебаний,
- дисковые излучатели с одной плосковогнутой поверхностью [2] и тарелкообразные излучатели [3], работающие как на толщинных, так и на планарных модах колебаний;
- пьезопреобразователи с естественно закрученными элементами, работающие на крутильных модах.

Для расчетов пьезопреобразователей применялась однотипная техника. Вначале проводился модальный и гармонический анализ пьезоэлектрических преобразователей без акустической среды. Далее для рассматриваемых преобразователей решались связанные задачи электроупругости и акустики в режиме установившихся колебаний в окрестности основных резонансных частот и определялись генерируемые волновые поля в акустической среде. При этом, расчеты амплитудно-частотных характеристик проводились вблизи частот электрических резонансов при возбуждении колебаний электрическим напряжением и вблизи частот электрических антирезонансов, когда колебания возбуждались электрическим током. Для сферических пьезоизлучателей были также исследованы нестационарные задачи.

Проведенные расчеты показали эффективность рассмотренных видов ультразвуковых пьезоизлучателей, выполненных из пористой пьезокерамики, особенно при возбуждении колебаний электрическим током.

Работа выполнена в рамках проекта конкурсной части государственного задания Минобрнауки России, № 9.1001.2017/4.6.

1. Домашенкина Т.В., Наседкин А.В., Рыбьянец А.Н. Конечно-элементный анализ фокусирующего ультразвукового пьезоизлучателя в режиме установившихся колебаний // Известия ЮФУ. Технические науки. 2010. № 6 (107). С. 174-179.
2. Наседкин А.В., Наседкина А.А., Рыбьянец А.Н. Моделирование и конечно-элементный анализ преобразователя из пористой пьезокерамики в форме диска с плосковогнутой поверхностью // Дефектоскопия. 2018. № 6. С. 23-31.
3. Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Rajagopal A. Analysis of cymbal transducer from porous piezoceramics PZT-4 with various material properties based on ANSYS / Advanced Materials – Proc. Int. Conf. “Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications”, PHENMA 2017. Springer Proceedings in Physics. Vol. 207. Eds. I.A. Parinov, S.-H. Chang, V.K. Gupta, Heidelberg, New York, Dordrecht, London: Springer Cham. 2018. Ch. 42. P. 533-547.
4. Nasedkin A.V., Rybyanets A.N. Finite element analysis of ultrasonic spherical piezoelectric phased array with split electrodes // 2016 Joint IEEE Int. Symp. on the Applications of Ferroelectrics, Europ. Conf. on Application of Polar Dielectrics, and Piezoelectric Force Microscopy Workshop (ISAF/ECAPD/PFM), 21-25 Aug. 2016, Darmstadt, Germany. IEEE Conf. Publ., 2016. P. 1-4.

DOI: 10.17223/9785946218412/144

**NUMERICAL ANALYSIS OF FRACTURE INITIATION AND PROPAGATION IN WEAK
POROUS SANDSTONES UNDER MULTIAXIAL COMPRESSION**

Eremin M.O.

*Institute of strength physics and materials science of Siberian branch of Russian academy of
sciences, Tomsk*

Rocks in their natural bedding are most often in a compressed state and don't lose the structural integrity until the occurrence of tensile stresses. Several studies of the mechanical behavior of rocks under the action of tensile stresses have been performed recently utilizing indirect tensile tests, e.g SCB (Semi-Circular Bend test) by Wang et al. (2019), CCNBD (Crack Chevron Notched Brazilian Disc test) by He and Hayatdavoudi (2018), three-point bending test by Vavro et al. (2017).

A large role has also become given to numerical simulation, which expands the understanding of mechanical behavior of rocks subjected to different loading conditions Stefanov (2008); Wang et al. (2019).

Sandstone is one of the most studied rocks. This is due to the fact that sandstone is often found in various engineering fields. Thus, study of mechanisms of sandstone failure, and generally, rocks failure is of a great importance for solving particular engineering problems. Indirect experimental techniques on determination of tensile strength give a good insight into the failure mechanisms. We utilized the Finite-difference method-based approach in order to simulate the deformation and failure of sandstone specimens. Numerical simulation is carried out in 2D plain strain and 3D formulations. Comprehensive formulation of applied method as well as basic equations of solid mechanics could be found in Wilkins (1999). The model includes equations for yield envelope, damage accumulation kinetics and fracture criterion. All model parameters are physical material constants, except the parameter t^* , which is chosen in order to fit the experimental data. Yield envelope is based on the modified Drucker and Prager (1952) model. Modification is related to the utilization of non-associated flow rule and dependence of materials strength constants on accumulated damage. Material is fractured if damage parameter D is equal to 1.

The most common two types of boundary conditions in numerical simulation are uniaxial loading with restricted sliding and free sliding on the surface of load application. Experimental loading conditions lie between these two types of loading, thus, we performed simulation with two types of boundary conditions.

Obtained results are in a satisfactory agreement with experimental observations reported elsewhere (Farrokhrouz and Asef (2017)).

1. Farrokhrouz M., Asef M.R. Experimental investigation for predicting compressive strength of sandstone // Journal of Natural Gas Science and Engineering. 2017. Vol. 43. P. 222–229.
2. Wilkins M.L. Computer Simulation of Dynamic Phenomena. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1999.
3. Drucker D.C., Prager W. Soil Mechanics and plastic analysis or limit design // Quaterly Applied Mathematics. 1952. Vol. 10. P. 157–165.
4. Stefanov Yu.P. Numerical modeling of deformation and failure of sandstone specimens // Journal of Mining Science. 2008. Vol. 44. P. 64–72.
5. Vavro L., Soucek K., Kytir D., Fila T., Kersner Z., Vavro M. Visualization of the Evolution of the Fracture Process Zone in Sandstone by Transmission Computed Radiography // Procedia Engineering. 2017. Vol. 191. P. 689–696.
6. Wang Y., Bui H.H., Nguyen G.D., Ranjith P.G. A new SPH-based continuum framework with an embedded fracture process zone for modelling rock fracture // International Journal of Solids and Structures. 2019. Vol. 159. P. 40–57.
7. He W., Hayatdavoudi A. A comprehensive analysis of fracture initiation and propagation in sandstones based on micro-level observation and digital imaging correlation // Journal of Petroleum Science and Engineering. 2018. Vol. 164. P. 75–86.

DOI: 10.17223/9785946218412/145

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗНАШИВАНИЯ ДВУХ ШЕРОХОВАТЫХ
ПОВЕРХНОСТЕЙ БИОСОВМЕСТИМОГО КЕРАМИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ ПРИ
ТРЕНИИ**

^{1,2}Еремина Г.М., ^{1,2}Смолин А.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

Трение между элементами конструкции эндопротеза оказывает значительное влияние на эксплуатационный ресурс эндопротеза. В первую очередь это относится к протезам тазобедренного и коленного суставов. Для улучшения трибологических характеристик металлических эндопротезов применяют упрочняющие наноструктурные покрытия. При этом в качестве металла, как правило, используется титан, а в качестве покрытия – нитрид титана (TiN). Изнашивание поверхностей в узле трения эндопротеза играет ключевую роль в механическом поведении системы «кость-эндопротез». Сложность исследования процессов изнашивания заключается в том, что его экспериментальное изучение достаточно трудоёмко и ограничено временным и пространственным разрешением современных приборов, а математические модели достаточно громоздки. В связи с этим в трибологии активно используются численные методы механики и физики. В данной работе предложено оценивать износ покрытия на мезоуровне через значения коэффициента трения и толщины квазижидкого слоя перемешивания в зоне контакта.

Для моделирования был использован метод подвижных клеточных автоматов (ПКА), который основан на дискретном представлении материала [1]. Его преимуществом над другими численными методами является возможность явного моделирования разрушения материала, включая генерацию и распространение трещин, а также таких сложных процессов, как перемешивание вещества. В связи с этим одним из ярких применений метода подвижных клеточных автоматов является моделирование процесса трения. Для описания упругопластического поведения в рамках метода ПКА используется теория пластического течения с критерием Мизеса. Пару элементов можно рассматривать как виртуальный бистабильный автомат (у него существуют два устойчивых состояния: связанная и несвязанная пара), что позволяет явно моделировать процессы разрушения в методе ПКА. Заданием правил перехода пары из состояния связанной в состояние несвязанной формулируется критерий разрушения моделируемого материала, который, вообще говоря, определяется физическими механизмами деформации материала.

По данным из литературных источников геометрические особенности покрытия TiN и его механические свойства определяются режимами нанесения [2]. Рассматривалось три варианта средней высоты шероховатости двух контактирующих поверхностей: 0,132 мкм, 0,15 мкм и 0,265 мкм. Механические характеристики материала покрытия соответствовали следующим значениям: $\rho = 52200$ кг/м³, $G = 104$ Гпа, $K = 173$ Гпа, Данные по пределу текучести $\sigma_y = 4.5$ GPa, $\sigma_b = 5.5$ GPa, $e_b = 0.075$ были получены с помощью обратного анализа диаграмм измерительного индентирования [3].

Геометрически модель для изучения трения (рис. 1, а) состоит из двух тел в форме параллелепипедов. Каждый параллелепипед условно делится на две части: одна является поверхностью контакта, а другая – её основанием. Шероховатость двух контактирующих поверхностей задавалась в препроцессоре программного комплекса MCA_3D. Для имитации окружения выбранного образца в процессе нагружения на его боковых гранях задавались условия периодичности вдоль осей X и Y.

В исходном состоянии модели тела разнесены так, чтобы выступы шероховатостей не соприкасались между собой. Для их сближения и начала контактного взаимодействия (рис. 1, б) к автоматам верхнего и нижнего слоя прикладывались скорости V_z по оси Z. Далее для обеспечения скольжения тел друг относительно друга автоматам верхнего и нижнего слоёв задавались скорости V_y вдоль оси Y, а для прижима блоков друг к другу – распределённые

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

силы (давление), направленные по оси Z . Задаваемые условия нагружения сверху и снизу модели имели симметричный характер и одинаковую величину, но направления их действия были противоположными. Во избежание слишком жёсткого нагружения в зоне трения было реализовано поэтапное увеличение прилагаемых нагрузок. Для имитации протяжённости образца вдоль оси Z , необходимо гасить упругие волны, возникающие в зоне трения и распространяющиеся по образцу вдоль этого направления. С этой целью для автоматов обоих регионов была введена специальная вязкая демпфирующая сила вдоль оси Z .

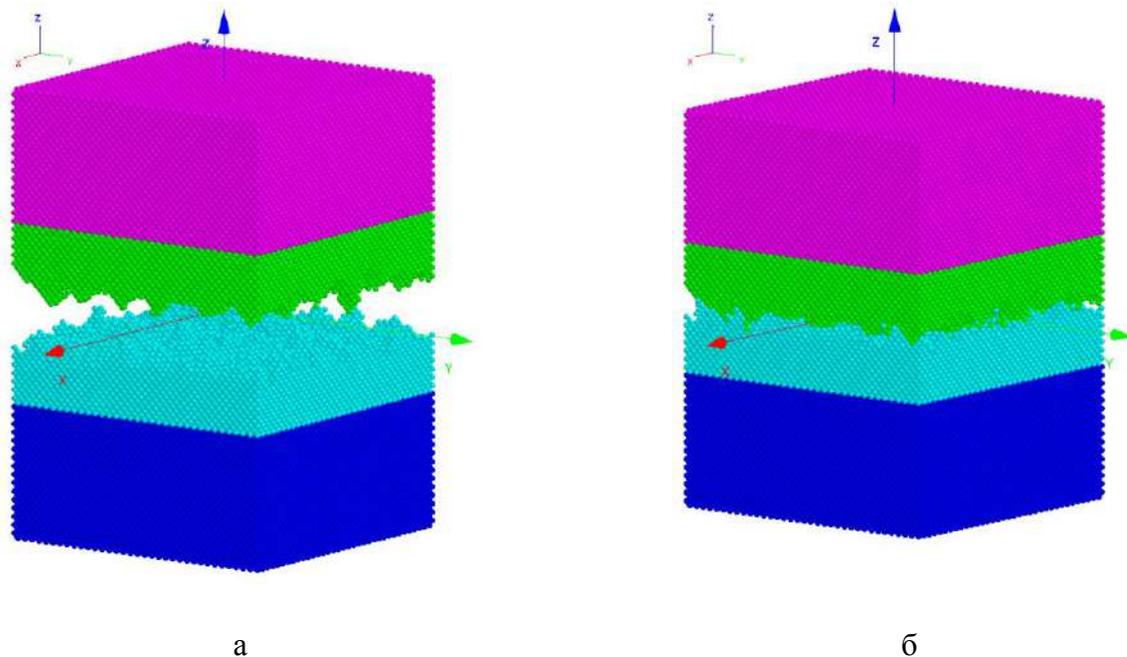


Рис. 1. Исходная модель двух шероховатых поверхностей (а) и её конфигурация в начале трения скольжения (б)

По результатам численного моделирования были получены значения коэффициента трения при различных значениях шероховатости, а также толщина промежуточного квазиджидкого слоя перемешивания, с помощью которой предлагается оценивать износ.

Acknowledgement: *The reported study was funded by RFBR according to the research project № 18-38-00323 and framework of the Russian Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013–2020 (Priority direction III.23).*

1. Shilko, E.V., Psakhie, S.G., Schmauder, S., Popov, V.L., Astafurov, S.V., Smolin, A.Yu. Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure // *Computational Materials Science*. 2015. V. 102. P. 267-285.
2. Bonello, T., Avelar-Batista Wilson, J.C., Housden, J., Gutmanas, E.Y., Gotman, I., Matthews, A., Leyland, A., Cassar, G. Evaluating the effects of PIRAC nitrogen-diffusion treatments on the mechanical performance of Ti–6Al–4V alloy // *Materials Science & Engineering A*. 2014. V. 619. P. 300-311.
3. Giannakopoulos, A.E., Suresh, S. Determination of elastoplastic properties by instrumented sharp indentation // *Scripta Materialia*. 1999. V. 40(10). P. 1191-1198.

DOI: 10.17223/9785946218412/146

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНООСНОГО СЖАТИЯ
ФЛЮИДОНАСЫЩЕННОГО МОДЕЛЬНОГО ОБРАЗЦА ПОКРЫТИЯ TiN**

^{1,2}Еремина Г.М., ^{1,2}Смолин А.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

Покрyтия TiN, полученные технологией PVD, используются при создании биосовместимых имплантов, в том числе эндопротезов тазобедренного сустава. При внедрении в организм поверхность покpытия начинает взаимодействовать с биологическими жидкостями, что приводит изменению его физико-механических свойств. Исследовать свойства материала покpытия насыщенного биологической жидкостью в организме *in vivo* не возможно. Исследование этого материала *in vitro* затруднительно, так как он существует только в форме покpытия. Однако с помощью компьютерного моделирования представляется возможным исследование его физико-механических свойств в условия максимально приближенным к условиям в живом организме, в том числе насыщенного жидкостью. Целью данной работы является численное моделирование одноосного сжатия флюидонасыщенных модельных образцов из покpытия TiN, с характеристиками, соответствующими PVD-технологии их получения.

Большинство работ по моделированию флюидонасыщенных биологических и биосовместимых материалов производится с помощью методов континуальной механики. Однако моделирование разрушения в данной группе методов является весьма опосредованным. В рамках данной работы применялась модель флюидонасыщенной среды, реализованной в методе подвижных (ПКА) [1] и гибридных клеточных автоматов (ГКА) [2-3]. В ПКА моделируемый материал рассматривается как ансамбль дискретных элементов (клеточных автоматов), взаимодействующих между собой по определённым правилам, позволяющим в рамках дискретного подхода описывать его деформационное поведение как изотропного упругопластического тела. Движение ансамбля элементов описывается уравнениями Ньютона-Эйлера. Главным преимуществом метода для решения поставленных задач является возможность явного учета несплошностей материала и моделирование разрушения. Основу метода ГКА составляет декомпозиция решаемой задачи на две подзадачи: 1) описание механического поведения вмещающего твёрдого тела (каркаса) и 2) описание переноса жидкости в фильтрационном объёме, представленном системой взаимосвязанных каналов, пор, трещин и т.д. Для описания механического поведения вмещающего тела используется метод подвижных клеточных автоматов, развиваемый авторами и являющийся одной из реализаций метода дискретных элементов.

Численно исследовалось влияние на механический отклик модельных образцов таких факторов, как наличие или отсутствие флюида в поровом пространстве материала, а также влияние размера среднего фильтрационного канала (проницаемости). При одноосном сжатии механическая нагрузка прикладывалась путем задания одинаковой скорости в вертикальном направлении верхнему слою автоматов при жестком закреплении автоматов нижнего слоя образца. На начальном этапе скорость движения автоматов верхнего слоя нарастала по синусоидальному закону от 0 до 1 м/с, а затем оставалась постоянной. Такая схема использовалась для устранения искусственных динамических эффектов и обеспечения плавного и быстрого выхода процесса деформирования образца на квазистационарный режим.

По результатам моделирования были построены диаграммы нагружения и получены визуальные изображения распределения давления жидкости в порах. Проанализировано влияние проницаемости и скорости нагружения на упругие и прочностные характеристики флюидонасыщенного покpытия.

Acknowledgement: *The reported study was funded by of the Russian President tuition. Russian Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013–2020 (Priority*

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

direction III.23 and Tomsk State University competitiveness improvement programme.

1. Shilko E.V., Psakhie S.G., Schmauder S., Popov V.L., Astafurov S.V., Smolin A.Yu. Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure // Computational Materials Science. 2015. V. 102. P. 267-285.
2. Zavsek S., Dimaki A.V., Dmitriev A.I., Shilko E.V., Pezdic J. and Psakhie. S.G. Hybrid cellular automata method. Application to research on mechanical response of contrast media // Phys. Mesomech. 2013. V.1. P. 42-51.
3. Shilko E.V., Dimaki A.V., Smolin A.Yu., Psakhie S.G. The determining influence of the competition between pore volume change and fluid filtration on the strength of permeable brittle solids// Procedia Structural Integrity. 2018. V. 13. P. 1508-1513.

DOI: 10.17223/9785946218412/147

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНДЕНТИРОВАНИЯ
ГУБЧАТОЙ КОСТНОЙ ТКАНИ**

^{1,2}Еремина Г.М., ^{1,2}Смолин А.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

Существует множество методов непосредственной оценки физико-механических характеристики костной ткани, такие, как растяжение, сжатие, трехточечный изгиб [1]. Однако все эти методы используются для исследований извлеченной из организма и обычно обработанной кости и потому не дают характеристики, необходимые для клинической практики. Однако в последнее время, микроиндентирование стало позиционироваться как процедура для клинического использования с минимальной инвазивностью. Кроме того с помощью микроиндентирования возможно локальное исследование пораженных участков костной ткани. В настоящее время активно развиваются неинвазивные методы диагностики свойств кости, основанные на визуализации структуры костной ткани (например МРТ, КТ) с последующим импортированием полученной информации в программные комплексы компьютерного моделирования. Известно, что костная ткань в живом организме является флюидонасыщенной средой, поэтому применение классических численных методов, описывающих поведение только “сухого” каркаса костной ткани недостаточно. В связи с этим актуальным является разработка численных моделей механического поведения флюидонасыщенных модельных образцов костной ткани при микроиндентировании.

Наиболее широкое применение в неинвазивной диагностике физико-механических свойств материалов занимают методы континуальной механики. Однако моделирование разрушения в данной группе методов является весьма опосредованным. В рамках данной работы применялась модель флюидонасыщенной среды, реализованной в методе подвижных (ПКА) [2] и гибридных клеточных автоматов (ГКА) [3-4]. В ПКА моделируемый материал рассматривается как ансамбль дискретных элементов (клеточных автоматов), взаимодействующих между собой по определенным правилам, позволяющим в рамках дискретного подхода описывать его деформационное поведение как изотропного упругопластического тела. Движение ансамбля элементов описывается уравнениями Ньютона-Эйлера. Главным преимуществом метода для решения поставленных задач является возможность явного учета несплошностей материала и моделирование разрушения. Основу метода ГКА составляет декомпозиция решаемой задачи на две подзадачи: 1) описание механического поведения вмещающего твердого тела (каркаса) и 2) описание переноса жидкости в фильтрационном объеме, представленном системой взаимосвязанных каналов, пор, трещин и т.д. Для описания механического поведения вмещающего тела используется метод подвижных клеточных автоматов, развиваемый авторами и являющийся одной из реализаций метода дискретных элементов.

Известно, что флюидосодержащая костная ткань при индентировании ведет себя как пороупругий материал и дает ошибку в определении модуля упругости по стандартным методикам, поэтому корректным является микроиндентирование с некоторой выдержкой по времени после внедрения индентора на заданную глубину [4].

Геометрически модель микроиндентирования костной ткани представляла собой параллелепипед из материала и трехгранный индентор с наконечником Берковича. Физико-механические свойства для губчатого вещества были заданы следующие: $\rho = 600$ кг/м³, $G = 3,3$ ГПа, $K = 17$ ГПа [5], проницаемость варьировалась в пределах литературных данных, свойства жидкости соответствовали соленой воде.

После построения модели микроиндентирования костной ткани для ее апробации численно исследовалось влияние на механический отклик модельных образцов губчатого вещества таких факторов, как наличие или отсутствие флюида в поровом пространстве материала, а также влияние размера среднего фильтрационного канала (проницаемости).

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Данная работа также была направлена на изучение эффекта выдержки нагрузки на механический отклик модельного образца при микроиндентировании.

По результатам моделирования были получены диаграммы нагружения, при обработке которых по методике Оливера-Фарра были получены значения твердости и модуля упругости. Результаты моделирования без и с выдержкой показали, что разница в значениях модуля упругости достигает 15%.

Acknowledgement: *The investigation has been carried out at financial support of the grant No. 17-11-01232 of the Russian Science Foundation*

1. Wahlquist J.A., Del Rio F.W., Randolph M.A., Aziz A.H., Heveran C.M., Bryant S.J., Neu C.P., Ferguson V.L. Indentation mapping revealed poroelastic, but not viscoelastic, properties spanning native zonal articular cartilage // *Acta Biomater.* 2017. V. 64. P. 41–49.
2. Shilko E.V., Psakhie S.G., Schmauder S., Popov V.L., Astafurov S.V., Smolin A.Yu. Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure // *Computational Materials Science*, 2015. V. 102, pp. 267-285.
3. Zavsek S., Dimaki A.V., Dmitriev A.I., Shilko E.V., Pezdic J. and Psakhie. S.G. Hybrid cellular automata method. Application to research on mechanical response of contrast media // *Phys. Mesomech.* 2013. V.1. P. 42-51.
4. Shilko E.V., Dimaki A.V., Smolin A.Yu., Psakhie S.G. The determining influence of the competition between pore volume change and fluid filtration on the strength of permeable brittle solids // *Procedia Structural Integrity.* 2018. V.13. P. 1508-1513.
5. Le Pense S., Chen Y. J. *Mech. Behav. Biomed. Mater.* 2017. V. 65. P. 90–101.

DOI: 10.17223/9785946218412/148

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО НАГРУЖЕНИЯ $[1\bar{1}01]$ -
МОНОКРИСТАЛЛОВ МАГНИЯ

^{1,2}Власова А.М.

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

²Уральский федеральный университет им. Б.Н.Ельцина, Екатеринбург

Для исследования была выбрана $[1\bar{1}01]$ -ориентировка монокристаллов магния с осью под 45° к оси симметрии шестого порядка с преимущественным базисным скольжением S_b , для которого фактор Шмида принимает максимальное значение равное 0.5 [1,2], критическое напряжение сдвига составляет 0,7 МПа [3]. Экспериментально эта ориентировка, наряду с другими, была впервые рассмотрена в ставшей классической работе [1], в которой построены деформационные кривые для низких скоростей деформации ($v = 30 \text{ с}^{-1}$) и обсуждаются возможные моды и механизмы пластической деформации. Ранее молекулярно-динамических расчетов по изучению деформационного поведения $[1\bar{1}01]$ монокристаллов не проводилось.

Моделирование выполнено с использованием вычислительного пакета LAMMPS [4], обработка расчетных данных выполнена при помощи Open Visualization Tools OVITO [5]. Моделируемая ячейка размером $9.7 \times 22.1 \times 41.4$ нм была выбрана в форме прямоугольного параллелепипеда, ребрам которого соответствовали кристаллографические направления $\mathbf{X} = [\bar{1}\bar{1}20]$, $\mathbf{Y} = [\bar{1}101]$, $\mathbf{Z} = [\bar{1}10\bar{1}]$. Одноосное сжатие осуществлялось путем переопределения скоростей атомов, находящихся в приповерхностных торцевых слоях толщиной 0.62 нм.

Модуль мгновенной скорости $|\dot{\epsilon}_i|$ рассчитывался как

$$|\dot{\epsilon}_i| = \left| \frac{l_i - l_{i+1}}{\Delta\tau \cdot l_0} \right| \quad (1)$$

Временная зависимость (зависимость от степени деформации) скорости деформации является показателем, позволяющим выявить неоднородность деформационных процессов. С одной стороны, скорость является той макроскопической характеристикой, которую легко измерить, которая характеризует монолитный образец. С другой стороны, изменение скорости от одного момента времени к другому, при постоянном внешнем усилии, указывает на неоднородность пластического течения.

На рис. 1а показана зависимость скорости $\dot{\epsilon}$ деформации от степени деформации ϵ (для удобства здесь и далее зависимость от времени τ заменена на зависимость от степени деформации ϵ).

Видно, что скорость $\dot{\epsilon} \approx 2.5 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ постоянна при $\epsilon < 0.05$. При $\epsilon > 0.05$ характер кривой становится неустойчивым. На кривой можно наблюдать аномальные скачки, максимальный из которых соответствует скорости деформации в 7 раз превосходящей среднюю скорость. До момента зарождения дислокаций были достигнуты значительные сдвиговые напряжения, которые обеспечили разгон дислокаций до больших скоростей. Если скорость пластической деформации за счет движения дислокаций значительно превышает скорость внешней (заданной) деформации, с которой производится сжатие, скорость деформации может оказаться отрицательной. Модуль скорости принимает значения в интервале $0 < \dot{\epsilon} < 1.4 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$. На рис. 1б показано изменение нормированной потенциальной энергии $\frac{E}{E_{\max}}$ системы атомов в зависимости от степени деформации ϵ . Локальный максимум при $\epsilon=0.05$ соответствует достижению критического напряжения для зарождения дислокаций.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

При $0.05 < \varepsilon < 0.06$ монотонная убыль потенциальной энергии соответствует зарождению дислокаций. При $\varepsilon > 0.06$ слабый монотонный рост свидетельствует о скольжении дислокаций. При $\varepsilon > 0.1$ кривая принимает характерную пилообразную форму с горизонтальной компонентой зубчатости (врезка на рис. 1б), что связано с междислокационным взаимодействием.

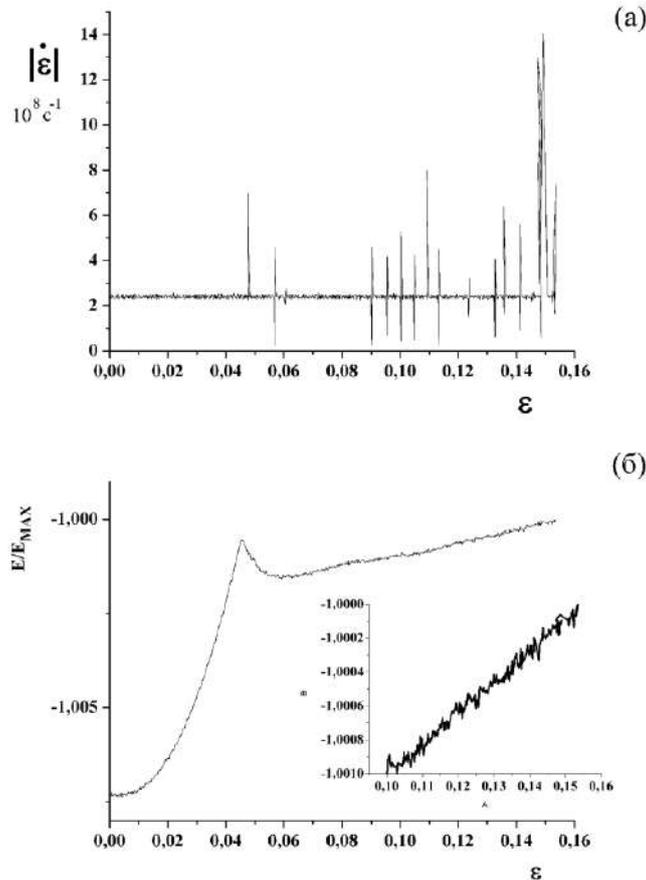


Рис. 1. Модуль скорости деформации в процессе деформирования (а) и соответствующее изменение потенциальной энергии (б)

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме “Давление” № АААА-А18-118020190104-3.

Расчеты проводились на суперкомпьютере ИММ УрО РАН «УРАН».

1. Robson J. Anisotropy and Asymmetry of Yield in Magnesium Alloys at Room Temperature // Metallurgical and materials transactions A. 2014. V. 45. P. 5226-5235.
2. Kelly E.W., Hosford W.F. Plane strain compression of magnesium and magnesium alloy crystals // Trans. AIME. 1968. V. 242. P. 5-13.
3. Zhang J. Joshi S.P. Phenomenological Crystal Plasticity Modeling and Detailed Micromechanical Investigations of Pure Magnesium // J. Mech. Phys. Solids. 2012. V. 60. No. 5. P. 945-972.
4. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. P. 1.
5. Stukowski A. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. V. 18. 2010. P. 015012.

DOI: 10.17223/9785946218412/149

COMPUTER MODELING OF STRUCTURE AND CALCULATION OF THE SHORT-RANGE ORDER PARAMETERS DISORDERED TWO-LAYERS AB GRAPHENE

^{1,2}Belosludtseva A.A., ¹Bobenko N.G., ³Barkalov L.D., ¹Ponomarev A.N.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science of SB RAS, Tomsk*

²*Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk,*

³*Saint Petersburg State University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg*

Computer modeling in modern science is an important method of research if the conducting of an experiment is impossible or requires a large amount of resources. Through modeling, a researcher can observe and draw conclusions about which factors influence certain material properties. Computer modeling of structure disordered two-layers graphene allows to study the effect of defects on electron properties to understand how to change the structure of the materials to obtain the characteristics that are necessary for further use.

The short-range order parameter can be obtained both experimentally and theoretically [1], and can serve a qualitative and quantitative characteristic of the defect structure of a material. Earlier, we carried out automation of short-range order parameters calculations for single-layer graphene [2], bcc, fcc, and simple cubic lattices [3]. The received data had a qualitative and quantitative match with the experimental data. Using the same method and experimentally determined locations of defects in the structure, similar software was developed for two-layers AB graphene.

The program is written the Java programming language. To model the structure of two-layers AB graphene with defects, a freely distributed Jmol applet was used, which allows to visualize structures with short-range order at the atomic level. When the program is opened, the crystal lattice of two-layers AB graphene appears in front of the user. In the upper right part of the program window there is a button that allows you to select the location of atoms of different sort: in the upper layer, above the layer, or between the layers.

Figure 1 shows a screenshot of the program window. The yellow color indicates the places where atoms of different sort may be located. If one of the yellow spheres is selected by the user, it changes color to red and bonds with the nearest carbon atoms appear. After entering information on the location of defects in the structure, one can move to the calculations of the short-range order parameter for the first and second coordination spheres. In the lower right part of the window there is a button "Short range". After clicking this button, the data on the short-range order values for the given configurations of defects will appear in the sidebar.

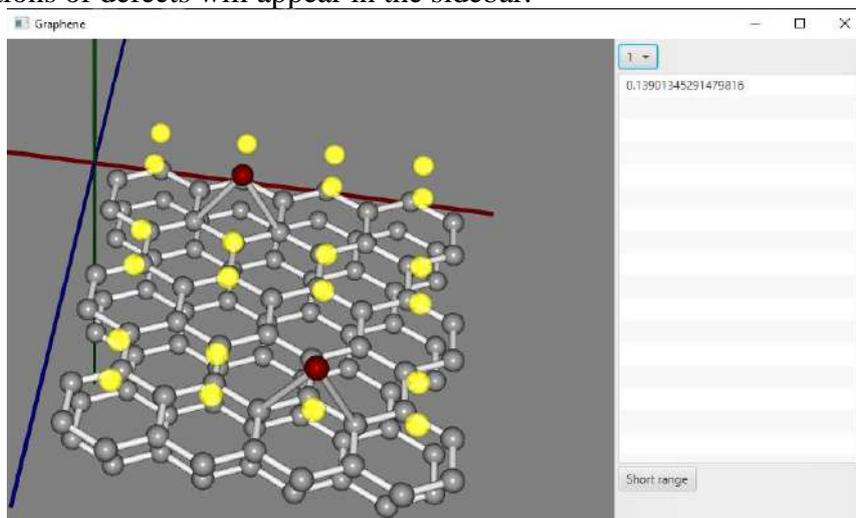


Fig.1. The program window, which shows the option choice of the location of impurity atoms above the layer. The placement of the yellow spheres is a possible choice for the location of an atom of a different sort above the layer, the placement of the red spheres is selected for the calculation of a different sort atoms, the gray spheres are carbon atoms.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

In the present program the calculated data of the short-range order parameters are different depending on configurations of defects and have different values both in magnitude and in sign. The results of the program were used to describe the electronic relaxation time, the density of electronic states and the electrical resistance of two-layers AB graphene. Through to the data on the values of the order parameters for specific disordered structures that were obtained in the process of program work, it became possible to predict what configuration of defects lets to open the gap in the density of states and which ones lead to the metallization of two-layers graphene.

This work was performed within the frame of the Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013-2020, line of research III.23. The reported research was funded by Russian Foundation for Basic Research and the government of the Tomsk region of the Russian Federation, grant No. 18-42-703019.

1. Iveronova V.I. and Katznelson A.A., Short-Range Order in Solid Solutions // Nauka. Moscow. 1977. P.256.
2. Bobenko N.G., Egorushkin V.E., Melnikova N.V., Ponomarev A.N., Belosludtseva A.A., Barkalov L.D. Low-temperature peculiarities of density of electronic states and electron transport characteristics in the disordered 2D graphene // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2018. 25. Pp. 152-157;
3. Barkalov L.D., Belosludtseva A.A. Modeling the structures of the fcc grids for calculating the parameters of the short-range order, // XIV International Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists "Prospects for the development of basic sciences": 2017. Vol 7. Pp. 24-26;
4. Gupta S.K., Soni H.R., Jha P.K. Electronic and phonon bandstructures of pristine few layer and metal doped graphene using first principles calculations // AIP Advances. 2013. No. 3(3). Pp. 032117.
5. Bobenko N.G., Egorushkin V.E., Melnikova N.V., Ponomarev A.N., Belosludtseva A.A., Barkalov L.D. Low temperature characteristics of electronic density of states in epitaxial graphene // Journal of Structural Chemistry. 2018. Vol.59. No.4. Pp. 853-859.

DOI: 10.17223/9785946218412/150

**NUMERICAL SIMULATION OF DEFORMATION AND FRACTURE IN
POLYCRYSTALLINE ALUMINUM AT DIFFERENT STRAIN RATES**

^{1,2}Sergeev M.V., ¹Balokhonov R.R., ¹Romanova V.A., ^{1,2}Emelianova E.S.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia*

²*National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia*

Based on the phenomenological physically-based model a viscoplastic constitutive equation has been developed for a three-dimensional case. Parameters of the thermomechanical model for aluminum alloy 6061-T6 are determined.

It is found that in the polycrystalline microstructure the local areas of plastic strain localization are formed at early stages of loading, when the homogeneous sample is still at the elastic stage of deformation. At the same time, at the developed stage of plastic flow, when the entire homogeneous sample experiences significant plastic strains, local regions of elastic strains are still observed in the polycrystalline sample. Accounting for the polycrystalline structure leads to lower values of the current yield stress in the macroscopic stress-strain curve.

At high strain rates there is a multiple cracking of the polycrystalline sample, while a single crack propagating perpendicular to the tension direction divides the sample into two parts at the strain rates lower than 100 s^{-1} . Volume fraction of the fractured material increases exponentially with the strain rate.

This work is supported by the Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013-2020, line of research III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/151

**КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНЫЙ АНАЛИЗ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧАЕМЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО
АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА ИЗ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ФИЛАМЕНТА**

¹Дудкин И.В., ^{1,2}Шилько Е.В., ¹Колубаев Е.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет*

Использование методов 3D печати изделий дает ряд преимуществ, таких как производство деталей сложной формы или быстрая перенастройка на печать другой детали. Все эти преимущества реализуются при печати методом электронно-лучевого аддитивного производства из металлического филамента. Получающийся материал имеет сложную слоистую структуру с чередованием слоев филамента и интерфейсных зон. Интерфейсные зоны образуются из-за расплавления поверхностей филаментов при нанесении нового слоя. Тем самым интерфейсная зона имеет характеристики, отличные от характеристик самого филамента. Целью данной работы являлось исследование характера и вида зависимостей механических характеристик получающейся слоистой структуры от механических параметров металлического филамента.

Рассматривалась структура, которая представляет собой чередование полос и интерфейсных зон по двум ортогональным направлениям. Моделировалось одноосное сжатие в направлении укладки филаментов и в перпендикулярном направлении. Для моделирования механического поведения структурных элементов (филаментов и интерфейсных зон) в области упругого отклика использовался обобщенный закон Гука для изотропных материалов. Для моделирования неупругого поведения блоков и интерфейсных зон использовался ассоциированный закон пластического течения для изотропных материалов с критерием пластичности Мизеса и изотропным деформационным упрочнением. В проводимых расчетах использовалось приближение линейного упрочнения. Соответственно, основными механическими характеристиками блоков и интерфейсных зон являлись: модуль Юнга и коэффициент Пуассона, предел текучести и коэффициент деформационного упрочнения. Расчеты проводились с помощью программного комплекса Fidesys, реализующего метод конечных элементов. Изучалось влияние величины упругих и неупругих характеристик материала интерфейсной зоны и ее толщины на интегральные механические характеристики образцов.

Результаты компьютерного моделирования показали выраженную анизотропию неупругого механического отклика материалов, получаемых методом электронно-лучевого аддитивного производства из металлических филаментов. Были получены соотношения для определения требуемых значений геометрических механических характеристик межслоевых интерфейсных зон, которые могут оцениваться на основе предъявляемых требований к механическим характеристикам изделия (пределу текучести, коэффициенту деформационного упрочнения). Для получения корректных оценок с применением этих соотношений должны быть известны механические характеристики подаваемого филамента и предусмотренные механические характеристики изделия.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)

DOI: 10.17223/9785946218412/152

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ВЛИЯНИЯ ЧЕРЕДОВАНИЯ
ФИЛАМЕНТОВ НА МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ МЕХАНИЧЕСКИЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ, ПОЛУЧАЕМЫХ
МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА**

¹Дудкин И.В., ^{1,2}Шилько Е.В., ¹Колубаев Е.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет*

Одной из ключевых современных технологических проблем является создание изделий сложной формы, обладающих заданными значениями прочности и пластичности. Новые методы электронно-лучевого аддитивного производства с чередованием подачи филаментов (проволок) различных металлических материалов являются одним из путей решения данной проблемы. Большое количество вариантов комбинирования различных материалов позволяет варьировать свойства готового объекта необходимым образом. Однако для определения нужного сочетания материалов филаментов и оптимального порядка их чередования в изделии необходимо иметь оценочные соотношения, связывающие эти параметры с интегральными макроскопическими характеристиками получаемого полиметаллического материала. Настоящая работа посвящена получению таких соотношений на основе компьютерного моделирования методом конечных элементов. Создание конечно-элементной модели и выполнение расчетов проводилось с использованием программного продукта CAE Fidesys.

В качестве объектов исследования рассматривались образцы в форме столбцов, образованных уложенными параллельно друг другу блоками двух разнородных материалов. Рассматривались различные чередования блоков и их объемные содержания в композиции

Основной акцент в исследованиях делался на параметрическом анализе влияния порядка чередования разнородных блоков, объемном содержании разнородных блоков и механических свойств интерфейсных зон на неупругие механические характеристики мезоскопических образцов в форме столбцов блоков. Анализировались такие ключевые инженерные характеристики как предел текучести, коэффициент деформационного упрочнения и предельное сопротивление (величина осевого напряжения, при котором достигается предел прочности и начинается разрушение какого-либо структурного элемента).

Результаты компьютерного моделирования показали, что эффективные (интегральные) механические характеристики столбцов разнородных филаментов определяются, главным образом, объемным содержанием этих филаментов. При этом предел упругости таких образцов равен пределу текучести наиболее «податливого» из материалов блоков, а характеристики диаграммы нагружения занимают промежуточное положение между диаграммами наиболее и наименее податливых материалов филаментов. В то же время порядок расположения филаментов в столбце имеет второстепенное значение и влияет, главным образом, на величину его предельной (к моменту начала разрушения) деформации.

Важными характеристиками полиметаллических материалов, получаемых методом электронно-лучевого аддитивного производства из металлических филаментов с существенно различающимися механическими свойствами, являются значения прочности и работы разрушения. Результаты моделирования показали, что величина прочности столбцов разнородных филаментов может быть с хорошей точностью оценена на основе линейной интерполяции значений прочности материалов филаментов и «межфиламентных» интерфейсных зон с весовыми коэффициентами, равными объемным долям этих компонентов композиции. По результатам исследований предложена формула для оценки величины прочности полиметаллических столбцов, состоящих из разнородных металлических филаментов, в условиях одноосного нагружения.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Полученные результаты впоследствии могут быть использованы при проведении оценок макроскопических механических характеристик полиметаллических изделий, получаемых методом электронно-лучевого аддитивного производства.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)

DOI: 10.17223/9785946218412/153

MODELING OF THE DYNAMIC OF SELF-ASSEMBLY BOROPHENE BY PFC

¹Zapolsky H., ²Bobenko N., ²Ponomarev A., ²Khon Yu.

¹Rouen university, Rouen, France

²Institute of the strength physic and materials science, Tomsk

Self-organization of the structure is one of the most promising ways to develop new materials with high physical properties. The phase field crystal method (PFC) appeared as the most preferred choice for studying these phenomena on mesoscale and can be supplementary to molecular dynamics (MD) and the Monte Carlo method (MC), taking into account the limitations of MD and MC computationally in a very effective way. In last years, the phase field crystal equations have also been improved [1,2], to take into account the effects of atomic scale: a characteristic of a polyatomic system has been introduced in terms of quasiparticles (phratons); A new simple form of phenomenological model potentials describing the direction, length and strength of the atom-atom bond is proposed, and the kinetic equations of the atomic density field theory (ADF) are used, describing diffusion on the atomic scale [3]. In our work, we use PFC to simulate the dynamics of self-assembly of a two-dimensional borophene structure. Borophene (two-dimensional sheet boron) - 2D new type of material which is grown on single crystal substrates in ultrahigh vacuum conditions [4] and, depending on the growth conditions, may have some modifications [5]. In this work, we studied the Pmmn2 modification of borophene, which in the structure of atomic clusters is similar to graphene layers with an additional atom in the center of the hexagon.

To simulate the borophene growth stages by the PFC method, the atomic distribution function was obtained:

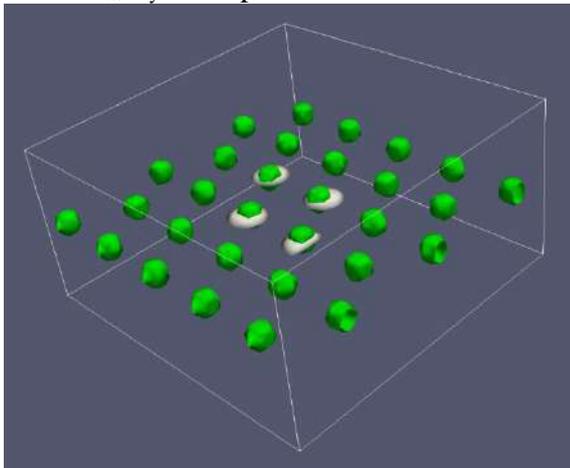
$$f(x, y) = \cos\left(\frac{ax}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}ay}{2}\right),$$

where a – lattice parameter of borophene.

Interatomic interaction potential has the following form:

$$V(k_x, k_y) = 4\cos\left(\frac{\pi}{a}k_x\right) \cos\left(\frac{\pi}{\sqrt{3}a}k_y\right),$$

where k_x, k_y – reciprocal lattice vectors.



Borophene structure modeled by the PFC. The initial structure is marked in white, the grown borophene 2D sheet is green in green.

In Fig. white color indicates the initial atoms; green — the final structure of borophene, which is obtained by redistributing the density of phratons into one layer with a gradual increase in the density and diameter of boron atoms.

Modeling a borophene 2D structure using the PFC method allows us to mark the growth dynamics of this material.

1. M. Lavrskyi, H. Zapolsky, and A.G. Khachaturyan. Fraton theory and modelling of self- assembling of complex structures // ArXiv: 1411.5587. 2014.
2. M. Lavrskyi, H. Zapolsky, and A.G. Khachaturyan. Quasiparticle approach to diffusional atomic scale self-assembly of complex structures: from disorder to complex crystals and double-helix polymers. // Npj Computational Materials. 2016. № 2. P. 15013.
3. G. Demange, M. Chamaillard, H. Zapolsky, M. Lavrskyi, A. Vaugeois, L. Lunéville, D. Simeone, R. Patte. Generalization of the Fourier-spectral Eyre scheme for the phase-field equations: application to self-assembly dynamics in materials. // Comput. Mater. Sci. 2018. № 144. P. 11-12.
4. Mannix, A.J., Zhou, X.-F., Kiraly, B., Wood, J.D., Alducin, D., Myers, B.D., Liu, X., (...), Guisinger, N.P. Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs. // Science. 2015. № 350. P. 1513-1516.
5. Wang, ZQ., Lü, TY., Wang, HQ. et al. Review of borophene and its potential applications. // Front. Phys. 2019. № 14. P. 33403.

DOI: 10.17223/9785946218412/154

**ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА АКУСТИЧЕСКУЮ
ЭМИССИЮ В ПРОЦЕССЕ ОБРАБОТКИ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ
ИССЛЕДОВАНИЕ.**

^{1,2}Никонов А.Ю., ^{1,2}Жармухамбетова А.М.

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Анализ акустической эмиссии (АЭ) – один из наиболее распространённых методов отслеживания состояния механических систем. Отличительной особенностью данного метода является возможность выявлять различные структурные изменения без какого-либо изменения свойств или формы материала, так называемый метод неразрушающего контроля. Кроме того, этот подход применяется при производстве деталей машин, например, в процессах обработки резанием, где АЭ используют для мониторинга состояния режущего инструмента или типа стружкообразования. Целью настоящей работы является изучение влияния размера индентора и возникающих дефектов структуры на сигналы акустической эмиссии в процессе обработки кристаллического образца скользящим индентором.

Моделируемый образец представлял собой медный прямоугольный параллелепипед размерами 36×18×9 нм. Расчёты проводились с использованием программного пакета LAMMPS [1]. Силы, действующие между атомами, описывались в рамках метода погруженного атома [2]. Вдоль оси Z лабораторной системы координат задавались периодические граничные условия. Моделируемая система рассматривалась как канонический ансамбль NVT (в системе сохраняется число атомов, объём и температура), содержащий около 400000 атомов. Температура системы составляла 1К. Низкая температура рассматривалась для исключения влияния теплового движения атомов.

Для нагружения системы использовался «комбинированный» индентор. Подобный индентор представлял собой абсолютно жёсткий цилиндр из атомов с радиусом R_m 2нм, 4нм и 6нм в различных задачах и полевой цилиндрический индентор с радиусом $R_m+0,2$ нм. Оси инденторов совпадали и были ориентированы вдоль оси Z. Индентор движется в направлении оси X с постоянной скоростью 10 м/с. Для получения сигналов акустической эмиссии на поверхности и в объёме образца выделялись площадки размерами 2×3×9 нм. Анализировались скорости движения центра масс сенсорных площадок в процессе нагружения. Для изучения внутренней структуры применялся метод анализа ближайших соседей [3] и алгоритм извлечения дислокаций [4]. Данные методы позволяют определить тип кристаллической структуры (ОЦК, ГЦК, ГПУ) и обнаружить дислокации определённого вида в кристаллах.

В качестве изменяемого параметра технологического процесса был выбран радиус кривизны индентора. В процессе обработки материала движущимся индентором может реализовываться 2 механизма пластической деформации: формирование стружки (оттеснение материала образца перед индентором) и вдавливание атомов образца в объём материала, приводя к накоплению упругой и пластической деформации. Моделировалось нагружение образца инденторами трёх радиусов при одинаковой глубине погружения. Для исследования сигналов применялся анализ Фурье. Рассматривались амплитудный спектр и спектр мощности. Было замечено, что увеличение радиуса индентора приводит к изменению сигнала, которое заключается в формировании ярко выраженных высокоамплитудных колебаний определённой частоты.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №17-79-10081.

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. № 1. P. 1–19.
2. Mendeleev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // Phil. Mag. 2003. V. 83. P. 3977–3994.
3. Honeycutt J.D., Andersen H.C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // J. Phys. Chem. 1987. V. 91(19). P. 4950–4963.
4. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2012. V. 20. № 8. P. 085007.

DOI: 10.17223/9785946218412/155

**АНАЛИЗ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ, ВОЗНИКАЮЩЕЙ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОЙ
ОБРАБОТКЕ КРИСТАЛЛИТА ЖЕЛЕЗА.**

^{1,2}Никонов А.Ю., ^{1,2}Жармухамбетова А.М.

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Одним из актуальных применений анализа акустической эмиссии (АЭ) является контроль режима технологического процесса в условиях промышленного производства, а также обнаружение побочных явлений, влияющих на качество производимых изделий, например, выявление нежелательных вибраций или автоколебаний. При этом возникает необходимость выявлять, что является источником акустического сигнала: процессы пластической деформации материала (изменение внутренней структуры) или механическое взаимодействие заготовки с инструментом в процессе обработки (трение, вибрации и т.п.). Целью настоящей работы является изучение влияния процессов пластической деформации на сигналы акустической эмиссии в процессе обработки кристаллического образца.

Для исследования процессов на атомном масштабе был выбран метод молекулярной динамики. Моделировался образец железа в форме прямоугольного параллелепипеда с размерами $36 \times 18 \times 9$ нм. Четыре нижних атомных слоя и четыре атомных слоя в плоскости $Y0Z$ с максимальной X координатой, были неподвижны, формируя подложку. Между подложкой и образцом задавался слой со свойствами отвода кинетической энергии атомов, позволяющий имитировать отвод температуры в объём материала. Температура системы составляла 1К, 5К и 100К. Низкая температура рассматривалась для исключения влияния теплового движения атомов. Для нагружения системы использовался «комбинированный» индентор. Подобный индентор представлял собой абсолютно жёсткий цилиндр из атомов с радиусом R_m 4нм и полевой цилиндрический индентор с радиусом $R_m+0,2$ нм. Оси инденторов совпадали и были ориентированы вдоль оси Z . Материальный индентор задавал адгезионные свойства за счёт взаимного притяжения атомов. На атомы образца, попадающие внутрь области полевого индентора, действовали силы по направлению от оси цилиндра. Таким образом, полевой индентор уменьшал силы адгезии между атомами образца и индентора. Индентор двигается в направлении оси X с постоянной скоростью 10 м/с. Для получения сигналов акустической эмиссии на поверхности и в объёме образца в плоскости $Y0Z$ выделялись площадки размерами $2 \times 3 \times 9$ нм. Анализировались скорости движения центра масс этих площадок.

Было установлено, что образование дислокаций вблизи индентора и их движение генерирует ярко выраженные сигналы на датчиках даже при температурах, отличных от нуля. При высоких температурах образца использование фильтра на основе быстрых преобразований Фурье позволяет устранить вклад, связанный с высокочастотными колебаниями атомов в принимаемом сигнале.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №17-79-10081.

DOI: 10.17223/9785946218412/156

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАЩИТНОГО ГАЗА НА ТЕЧЕНИЕ ПЛАЗМЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ДУГИ И РАСПЛАВЛЕННОГО МЕТАЛЛА

¹Кузнецов М.А., ¹Солодский С.А., ¹Крюков А.В., ¹Крампит М.А.

¹Юргинский технологический институт (филиал) Томского политехнического университета

Для изучения влияния защитного газа на течение плазмы электрической дуги и расплавленного металла, оценки изменения его скорости и давления провели моделирование истечения газа из плазмотрона.

Изменение динамики защитного газа влечет за собой изменение процессов, протекающих в плазмотроне (образование и перенос капель, металлургические процессы в капле).

Для моделирования влияния защитного газа на течение плазмы электрической дуги и расплавленного металла использовали программу CONSOL Multiphysics [1,2].

Для анализа работы плазмотрона была разработана математическая модель, описывающая течение плазмообразующего газа внутри плазмотрона. Для построения компьютерной модели на программном комплексе CONSOL Multiphysics в качестве входных параметров используются распределение скоростей потока газа, различный газ, расход газа, геометрические размеры плазмотрона [3,4].

Для описания задачи использовалось уравнение ламинарного течения газа. Моделирование движения газа в плазмотроне осуществляется на основе дифференциального уравнения ламинарного течения. На рисунке 1 представлена модель в объеме, которой происходит моделирование защитного газа [5].

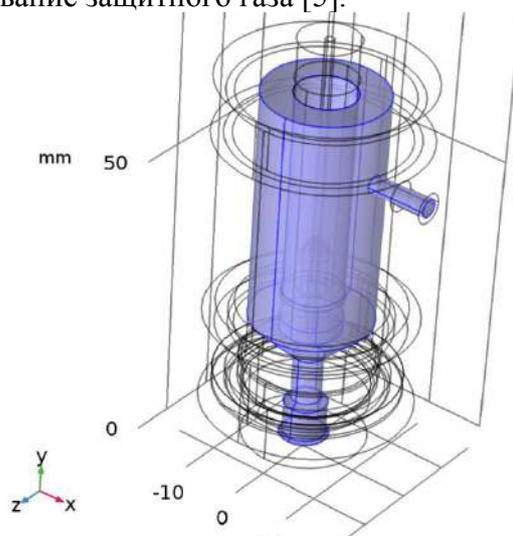


Рис. 1. Расчетная модель

В рамках разработанной модели было исследовано влияние течения защитного газа (углекислый газ, аргон, гелий) и давления расхода газа в диапазоне от 1 л/мин до 30 л/мин на плазму дуги.

В математической модели были заданы граничные условия: расход газа на входе плазмотрона и свободная граница на выходе из плазмотрона.

По результатам расчета оценивалось давление и вид газа на входе, давление газа, скорость газа и влияние газа на плазму дуги к выходу.

Результаты по вычислению расчетной модели представлены на рисунке 2.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

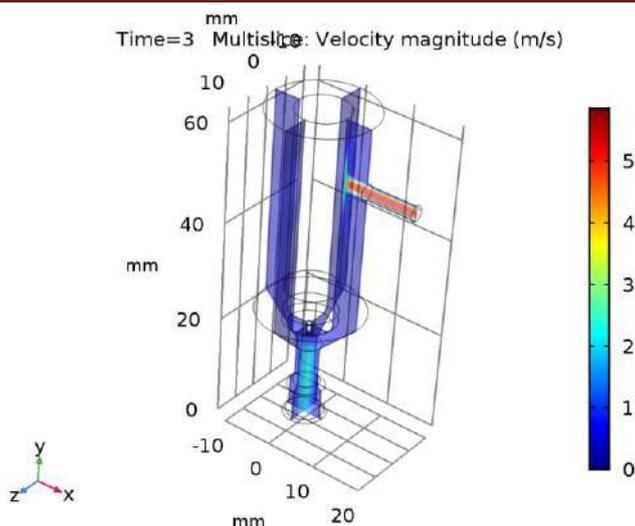


Рис. 2. Модель течения газа в плазмотроне

Вывод: Разработанная расчетная модель позволяет рассмотреть течение газа в плазмотроне в зависимости от его расхода, определить давление газа на входе плазмотрона, распределение потока газа внутри плазмотрона и скорость газа и давление на выходе из плазмотрона. Варьируя данными параметрами можно определить влияния различного защитного газа (углекислый газ, аргон, гелий или их смеси) на течение плазмы дуги, каплю электродного металла, а также влияние на расплавленный металл. Изменяя данные параметры определяем оптимальное давление газа на входе и оптимальную скорость газа на выходе для получения капель микро и –нанодиапазона.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-79-10035)

1. Tashev P, Koprinkova-Hristova P, Petrov T, Kirilov L, Lukarski Y.J. Mathematical modeling and optimization of parameters of the mode for tungsten-inert gas remelting with nanomodification of the surface layer // J. Mater. Sci. Technol. 2016. V. 24. № 4. P 230–243.
2. Peng J, Yang L. Mathematical model on characteristics of V groove molten pool during MIG welding // Huagong Xuebao / CIESC J. 2016. V. 67. № S1, 31. P. 117-126.
3. Биленко Г.А., Хайбрахманов Р.У., Коробов Ю.С., Компьютерное моделирование при разработке технологии сварки тонкостенных деталей из высокопрочной стали // Металлург. 2017. №4. С. 25-29.
4. Kumar N., Bandyopadhyay A. Simulation of the effects of input parameters on weld quality in laser transmission welding (LTW) using a combined response surface methodology (RSM)-finite element method (FEM) approach // Opt. Lasers Eng. 2017. V. 36. № 4-6. P. 225-243.
5. Chinakhov D.A., Vorobjev A.V., Tomchik A.A. Simulation of active shielding gas impact on heat distribution in the weld zone // Mater. Sci. Forum. 2013. V. 762. P. 717-721.

DOI: 10.17223/9785946218412/157

**FRACTURE MODELING IN SPECIMENS WITH I-, V- AND U-SHAPED NOTCHES:
A PROBABILISTIC APPROACH IN EXCITABLE CELLULAR AUTOMATA METHOD**

¹Maksimov P.V., ¹Moiseenko D.D., ^{1,2}Panin S.V.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk*

²*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk*

When conducting full-scale tests of loaded structural materials the information obtained is often either incomplete or difficult to be extracted from a real experimental data. Additional information and appropriate interpretation of the results can be obtained using numerical modeling. The application of this approach within a reasonable calculation time allows one to obtain results and formulate preliminary recommendations. To solve this problem, along with determining the optimal set of physical-chemical properties, of particular influence is geometrical shape of the machine part that, among other factors, is taken into account at the design stage. In doing so during the calculation the required thickness, shape, number and size of holes, grooves, fillets and other geometric heterogeneities are to be determined [1].

The previously proposed method of excitable cellular automata allows one to vary the shape and structure of the specimen under simulation. This approach has proven its correctness at solving similar problems [2]. However, the authors previously did not pay attention to aspects of modeling fracture processes, primarily due to the complexity of developed fracture criteria that could be effectively used. In this paper, it is proposed to use a probabilistic approach to model crack nucleation in local regions of the material. This approach is based on the ideas of the physical mesomechanics of materials where particular attention is paid to the aspects of the influence of the effective curvature of the crystalline lattice at the mesoscale [3].

To describe the processes of energy redistribution in a loaded solid an original method of excitable cellular automata (SECAM) was previously developed and described in detail [4]. This approach is aimed at simulation of open system behavior with continuous energy pumping. In doing so, development of self-organization and nucleation of new structures processes can be studied. The main difference of the proposed method from the most of discrete ones is related to the fact that an active element of the cellular automaton describes a fixed region of a space through which energy and matter flow.

The method of excitable cellular automata allows explicitly taking into account the influence of internal interfaces. The mesh of active elements is divided into clusters each of which models a grain that has its own orientation of the crystalline lattice with corresponding Euler angles. The basis of the method is a modified Thornbull relation according to which the velocity of the energy flow through the boundary between neighbours is proportional to the stress at this boundary. In doing so, in a loaded solid there are zones with nonzero force moments. When they reach maximum values at the interfaces the local increase in the material curvature takes place.

Numerical experiments were carried out for aluminum specimens $40 \times 10 \times 30 \mu\text{m}$ in size with I-, V- and U-shaped notches. For each experiment the application of tensile load was simulated along the horizontal axis X at the velocity of 400s^{-1} during $100 \mu\text{s}$. The distribution pattern of the X component of the specific angular momentum at the front faces of the studied specimens (Fig. 1) indicates on the following. The region located at the notch tip accumulates elevated values of this component, and this effect is most pronounced in the case of the sharpest I-shaped notch. It should also be noted that the highest values of the X component in the vicinity of the notch are achieved in the specimen with U-shaped notch. Such an increase in the level of the local moments of forces can lead to further nucleation and propagation of a crack in the notch tip zone.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

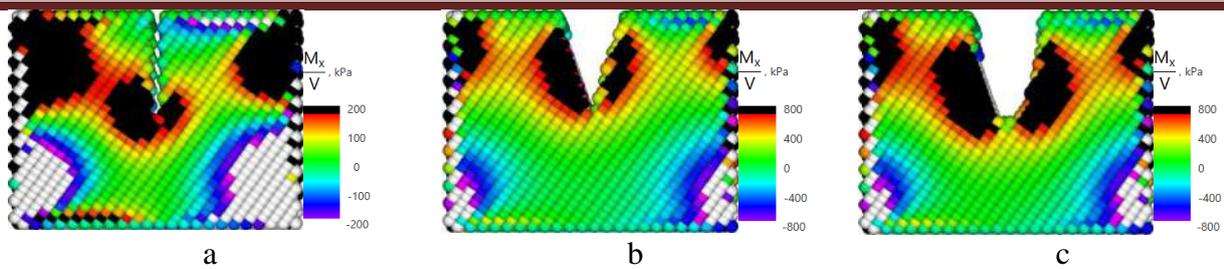


Fig. 1. Distribution patterns of the X component of the specific angular momentum in the specimen with I-, V- and U-shaped notches at time point of 5 (a, b, c) μ s.

In fact, in the framework of solid mechanics fracture should more intensively develop in the material with a sharper notch at least for a reason of higher stress concentration coefficient. In this study, we did not aim at analysis of crack growth itself but the processes of plastic deformation preceding it. From this point of view, a gradual local stress relaxation in the region of the sharper notch tip contributes to their less intense accumulation. This explains the reason why the component X of the specific force moment for the I-shaped notch is less than that for the specimens with V- and U-shaped ones.

On the other hand, in a specimen with a blunt notch, the probability of crack nucleation in front of the notch tip is the smallest. This is consistent with the classical ideas of fracture mechanics. This favors the promise of the proposed approach for modeling the processes of crack propagation by the method of excitable cellular automata. This will be the subject of the next research in the development of this study.

The use of the method of excitable cellular automata made it possible to determine the geometrical shape of the notch which is most effective for reducing the likelihood of crack initiation in the specimen under uniaxial tension. Further studies including the implementation of the transition of the active element to a fracture state as well as parametric studies of the influence of the plasticity coefficient to the fracture criteria will provide a more objective pattern of the simulated processes.

1. Panin S.V., Maruschak P.O., Vlasov I.V., Moiseenko D.D., Maksimov P.V., Berto F., Bishchak R.T., Vinogradov A. The role of notch tip shape and radius on deformation mechanisms of 12Cr1MoV steel under impact loading. Part 2. Influence of strain localization on fracture and numeric simulations // *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures*. – 2017. – Volume 40(11). – pp. 1838–1853. doi: 10.1111/ffe.12602.
2. Panin V.E., Moiseenko D.D., Maksimov P.V., Panin S.V. Effects of plastic distortion in the lattice curvature zone of a crack tip // *Physical Mesomechanics*. – 2017. – Vol. 20. – No. 3. – pp. 280–290. doi: 10.1134/S1029959917030043.
3. Panin V.E., Surikova N.S., Elsukova T.F., Vlasov I.V., Borisyuk D.V. Grain boundary sliding and rotational mechanisms of intragranular deformation at different creep stages of high-purity aluminum polycrystals at various temperatures and stresses. *Materials Science and Engineering: A*. 2018. V. 733. P. 276-284.
4. Moiseenko D.D., Maksimov P. V., Panin S. V., Babich D. S. and Panin V. E. Defect Accumulation in Nanoporous Wear-Resistant Coatings Under Collective Recrystallization: Simulation by Hybrid Cellular Automaton Method. – *Handbook of Mechanics of Materials*, edited by Hsueh CH. et al. – Springer, Singapore. – 2019. – 1157-1190.

DOI: 10.17223/9785946218412/158

**FINITE DEFORMATION ANALYSIS OF A PRESTRESSED ELASTIC BEAM AFTER
THE LAYER ADDITION**

¹Levin V.A., ^{2,3}Zingerman K.M., ¹Vershinin A.V., ¹Konovalov D.A.

¹*Lomonosov Moscow State University, Moscow*

²*Tver State University, Tver*

³*Tula State Lev Tolstoy Pedagogical University, Tula*

An approach to the numerical modeling of stress state in a two-layered beam is developed for finite deformations. It is assumed that the first layer of the beam is preliminarily stressed, and then the second layer is added. The problem is formulated and solved using the theory of repeatedly superimposed finite strains. The spectral element method is used for the analysis. The spectral elements of variable order are used on non-conformal unstructured meshes. The computations are performed for the case of plane strain. It is assumed that the beam is made of the weakly compressible Mooney-Rivlin material. The incomplete junction of layers is considered. The numerical results are given for the case in which the first layer is preliminarily stretched along its axis. It is analyzed how the curvature of the beam after the junction of layers depends on the value of preliminary stretch. It is shown that this dependence is not monotone. The stress distribution in the composite beam is shown for a particular case.

The proposed approach can be useful for the modeling of additive manufacturing. In this case the preliminary strains and stresses in the first layer are caused by thermal effects.

The work was financially supported by the Russian Federation through the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Agreement No. 14.577.21.0271, project ID RFMEF157717X0271).

DOI: 10.17223/9785946218412/159

**3D-FINITE ELEMENT SIMULATIONS OF WEDGE SPLITTING TEST OF ZrO₂-Y₂O₃
CERAMIC DOUBLE CANTILEVER BEAM WITH CHEVRON NOTCH**

¹Lasko G., ²Deryugin Ye., ³Danilenko I., ³Lakusta M., ¹Schmauder S.

¹*Institute for Materials Testing, Materials Science and Strength of Materials, University of Stuttgart (IMWF), Stuttgart, Germany*

²*Institute of Strength Physics and Materials Science (ISPMS), Tomsk, Russia*

³*Donetsk Institute of Physics and Engineering named after O.O. Galkin, National Academy of Science of Ukraine, Kiev, Ukraine*

Zirconia ceramics are materials of great scientific and practical importance because of their combination of properties: high strength, chemical inertness, good abrasion and wear resistance, as well as high melting point and high electrical resistivity. Due to their excellent properties, ceramics are used in a wide range of applications, including the chemical industry, machinery, electronics, aerospace and biomedical engineering.

However, the fracture toughness of zirconia ceramics is the major property that needs to be enhanced in order to satisfy high requirements for advanced applications in industry and medicine. To overcome the inherent brittleness of these ceramics, ceramic matrix composite materials in particular zirconia-alumina composites are being developed [1]. Since metallic inclusions limit the high temperature application of ceramic composites or its application in an aggressive environment, ceramic-ceramic composites should be all-purposes composites.

With the era of miniaturization of devices, fracture toughness characterization of the components is a main issue in materials research. The traditional method of fracture toughness determination can not apply for fracture toughness estimation of such a brittle material.

For this purpose it is necessary to develop new methods of fracture toughness determination, free from restrictions imposed on the sizes of specimens in standard methods of testing. One of such a method is the wedge splitting method of the double cantilever beam with chevron notch.

The present contribution concentrates on the analysis of numerical modelling of the wedge splitting method which is used for the experimental determination (estimation) of fracture toughness. Finite element simulations allow to analyze the stress distribution in front of the crack tip and to assess the efficiency of the experimental method of testing.

The specific fracture energy determined in an experiment was taken as input parameter for cohesive zone method simulations of crack propagation.

Wedge splitting of a double cantilever beam with Chevron notch (Fig. 1) has been simulated with the FEM using two methods: a Cohesive Zone Modelling (CZM) approach and the Element Elimination Technique (EET) [2]. The results of these simulations have been compared with experimental findings.

For the cohesive zone modelling approach, the different-traction-separation laws were implemented in the Finite Element Software ABAQUS and the resulting force-displacement curves were obtained. For the traction-separation law the fracture energy, which is the area under the traction-separation curve has been taken from the wedge splitting experiment [3].

The cohesive strength has been defined by inverse modelling by comparison of the results of simulations with the resulting Force-Displacement curves. By such an approach the maximum force value, achieved in experiment has been obtained in simulations but the match of the shape of the Force-displacement curve obtained in experiment and in simulations has been not achieved with this method.

In EET the maximum principal stress has been taken as the criterion of crack initiation. The friction coefficient between the wedge and the arm of the DCB was found to affect drastically the results of simulations. The best match of the calculated and the experimental Force-displacement curve has been achieved in simulations with the EET-technique (Figure 1b).

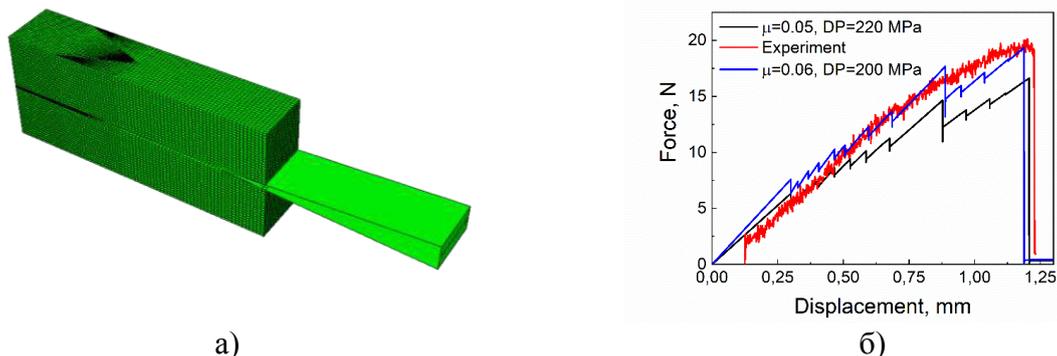


Fig. 1. The scheme of loading and the FE-mesh of a DCB with chevron notch (a); Comparison of the Force-Displacement curves obtained in two simulations with two different friction coefficients (?) using the EET with an experimentally obtained one.

Conclusions

- Simulations of DCB-wedging of the specimen from ceramics with chevron notch have been performed with the finite element method applying the Cohesive Zone modeling approach and the Element Elimination technique.
- By variation of cohesive strength and keeping the fracture energy constant as obtained in experiment, constant force-deflection curves have been obtained and compared with experimental ones.
- The influence of different parameters of the traction-separation law (the shape of the TSL was assumed to be bilinear, trapezoid, with cohesive strength and stiffness obtained from ...) on the Force-COD-curve has been analyzed.
- Overall, the trend, peak load and COD of the present numerical results obtained with the calibrated cohesive parameters matches well the experimental result.
- With the Element Elimination technique by variation of the maximum principle stress and friction coefficient a better match to the experimental Force-Deflection curve has been achieved. The reason could be that no restrictions were imposed on the crack path (as it is in typically required in the CZM approach).

Acknowledgements

The research has been financially supported by the Volkswagen Foundation within the framework of Trilateral Partnership between the scholars from Germany, Ukraine and Russia (aZ. 90355). This financial support is gratefully appreciated.

1. J. Li, R. Watanabe, Fracture toughness of Al_2O_3 -particle-dispersed Y_2O_3 partially stabilized zirconia, *J. Am. Ceram. Soc.* 78 (4) (1995) 1079-82.
2. G. Lasko, U. Weber, M. Apel, R. Berger, S. Schmauder, Finite Element Analysis of Crack Propagation in AlSi7Mg0.3\% Cast Alloys using Macro- and Micro-scale Levels, *Adv. Eng. Mat.* 17 (2015) 1536-1546.
3. E.E. Deryugin, S. Schmauder, V.E. Panin, M.O. Eremina, I.V. Vlasov, N.A. Narkevich, G.V. Lasko, I. Danilenko, O.S. Kvashnina, Study of deformation and fracture of $\text{ZrO}_2+3\%\text{Y}_2\text{O}_3$ ceramics by wedge splitting of a chevron-notched specimen // *Engineering Fracture Mechanics* 218 (2019) 106573 <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2019.106573>

DOI: 10.17223/9785946218412/160

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ НЕФТЕГАЗОПРОВОДОВ С УЧЁТОМ ИСКРИВЛЕНИЙ И КОМПЛЕКСА ВОЗДЕЙСТВИЙ

¹Сильвестров С.А., ²Кантемиров И.Ф.

¹ООО “Астрапроект”, Казань, Россия,

²УГНТУ, г.Уфа, Россия

Расчеты напряженного состояния нефтегазопроводов в соответствии с нормативными документами, как правило, производятся по формулам без учета исходной (строительной) кривизны в ненапряженном состоянии. В процессе эксплуатации на некоторых участках нефтегазопроводов происходят активные грунтовые процессы (размыв, развитие карста, пучение, таяние в многолетнее-мерзлых зонах). Всё это отражается на напряженном состоянии, снижает безопасность трубопровода и требует учёта при оценке опасности дефектов, обнаруженных при периодических обследованиях. В последние годы существенно возросли требования к точности расчётных оценок, особенно на потенциально опасных участках трубопроводов и участках со сложной конфигурацией. Поэтому требуется разделить влияние кривизны начальной (в ненапряженном состоянии) и кривизны, возникшей при упругом изгибе трубопроводов.

В большинстве случаев расчёты строятся на основе данных, полученных методами внутритрубной диагностики. При этом обычно используется криволинейная координата s – длина пути, пройденного снарядом по трубопроводу от точки запуска. Поэтому в математической модели также предпочтительно иметь не декартову прямую ось z , соединяющую начало и конец трубопровода, а криволинейную координату s – совпадающую с реальной осью трубопровода с учётом его кривизны.

Однако, в проводимых расчетах уравнения равновесия трубопровода в вертикальной плоскости с учётом кривизны строятся с двумя принятыми допущениями:

1) Считается, что продольная деформация определяется только продольными смещениями по формуле $\varepsilon_s = dw/ds$ (Это допустимо только на подземных трубопроводах с большим радиусом кривизны).

2) Принимается, что кривизна трубопровода постоянна по всей длине участка. Поэтому при решении требуется разбивка трубопровода на отдельные участки с постоянной кривизной, затем совмещение отдельных решений. Это всегда вызывает трудности.

В настоящей работе поставлена задача получить уравнения равновесия в общем виде, не прибегая к вышеуказанным допущениям.

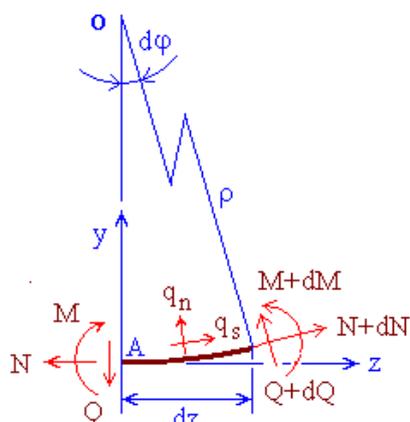


Рисунок 1 – Расчётная схема

Рассмотрим элемент трубы длиной ds (рис.1), которая мала, поэтому малы и величины ds (дуга), dz (хорда), $d\phi$ (угол). Распределённые силы, действующие на элемент (вес, реакция грунта, давление продукта, воды, ветра и т.д.), обозначим q , поперечные и продольные составляющие – q_n и q_s . Действие смежных участков трубопровода слева и справа заменим продольными силами N и $(N+dN)$, поперечными силами Q и $(Q+dQ)$, изгибающими моментами M и $(M+dM)$. При деформировании элемента ds точки смещаются в поперечном (n) и продольном (s) направлениях на v и w .

Примем подвижную криволинейную систему координат $(s-n-m)$ (см. Рис.1), где s – кривая, направленная по оси трубы; n, m – направления, перпендикулярные s , при этом n находится в вертикальной плоскости, m – в горизонтальной. Перемещения трубы по направлениям m, n, s обозначим u, v, w соответственно.

Произведя необходимые вычисления, находим:

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

- уравнение продольно-поперечного изгиба трубопровода с учётом кривизны, внутреннего давления, действующих продольных и поперечных сил:

$$EJ \cdot \frac{d^4 v}{ds^4} - N_{эф} \left(\frac{d^2 v}{ds^2} + K_{0n} \right) - q_{n(внеш)} = 0 \quad (1)$$

- уравнение продольно-поперечного изгиба в горизонтальной плоскости

$$EJ \cdot \frac{d^4 u}{ds^4} - N_{эф} \left(\frac{d^2 u}{ds^2} + K_{0m} \right) - q_{m(внеш)} = 0 \quad (2)$$

-уравнение продольного сдвига с учётом кривизны, которое описывает продольное смещение w . Такое смещение происходит под действием продольных внешних сил q_s и осевой силы N :

$$\frac{f_1 + f_2 + f_3}{\sqrt{(u' + K_{0m} w)^2 + (v' + K_{0n} w)^2 + (1 + w' - K_{0m} u - K_{0n} v)^2}} + \frac{J}{F} [(K_{0n} + u'')u''' + (K_{0m} + v'')v'''] + \frac{q_s}{EF} = 0; \quad (3)$$

$$f_1 = (u' + K_{0m} w)(u'' + K_{0m} w' + K'_{0m} w);$$

$$f_2 = (v' + K_{0n} w)(v'' + K_{0n} w' + K'_{0n} w);$$

$$f_3 = (1 - K_{0m} u - K_{0n} v + w')(w'' - K_{0m} u' - K'_{0m} u - K_{0n} v' - K'_{0n} v).$$

Таким образом, получены искомые дифференциальные уравнения (15, 16, 24), которые записаны в криволинейных координатах и учитывают неоднородность трубопровода по начальной кривизне. Эти уравнения в частных случаях переходят в известные формулы, и в некоторых простейших случаях поддаются аналитическому решению. Но в более общих и интересных для практики случаях решение можно получать только численными методами, например, методом конечных разностей.

Работоспособность подхода опробована и подтверждена на примере участка подземного нефтегазопровода с характеристиками: диаметр 1220 мм, толщина стенки 13 мм, рабочее давление 6,0 МПа, перепад температуры +20°C; коэффициенты постели (сопротивляемость) грунта в поперечном и продольном направлениях 4 МПа/м. Рельеф местности равнинный, но на одном участке образовалась ступень с разницей высотных уровней 2 м. Тем не менее, трубопровод проложен без применения отводов, а переход от одного уровня на другой происходит плавно на участке длиной 50 м (450 – 500 м). Профиль трубопровода соответствует линиям v на графиках. Глубина трубопровода 1 м по верхней образующей.

В работе получены дифференциальные уравнения равновесия трубопровода в общем виде (1, 2, 3), которые составлены в криволинейных координатах и учитывают неоднородность участков по кривизне и действующим силам. Полученные уравнения можно использовать при анализе напряженно-деформированного состояния нефтегазопроводов с учётом их исходных искривлений, особенностей взаимодействия с грунтом и опорами, термосиловых режимов эксплуатации. Уравнения удобны для обработки результатов внутритрубной диагностики, поскольку используют одну и ту же криволинейную систему координат, отображающую реальную геометрическую конфигурацию оси трубопровода.

DOI: 10.17223/9785946218412/161

**АЛГОРИТМ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДОПУСТИМЫХ ОТКЛОНЕНИЙ
ПЕРЕМЕЩЕНИЙ ПРИ ОЦЕНКЕ ДЕФОРМАЦИИ МАТЕРИАЛОВ
МЕТОДОМ КОРРЕЛЯЦИИ ЦИФРОВЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ**

¹Титков В.В., ^{1,2}Панин С.В., ¹Ерёмин А.В., ¹Любутин П.С.
¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
²Томский политехнический университет, Томск

Как для способа измерения, точность имеет критическое значение для метода DIC [1, 2]. В последовательности измерений DIC участвует множество источников ошибок, возникающих как из экспериментальной, аппаратной части, так и в части программной реализации корреляционного алгоритма, что затрудняет количественную оценку погрешности [3].

```
mindFnois(F, dF) := | i ← 0
                    | while i < rows(F)
                    |   | maxV ← -99999
                    |   | minV ← 99999
                    |   | istart ← 0 if i - nCA < 0
                    |   | otherwise
                    |   |   | istart ← rows(F) - 2nCA if i + nCA > rows(F) - 1
                    |   |   | istart ← i - nCA otherwise
                    |   | istop ← 2nCA if i - nCA < 0
                    |   | otherwise
                    |   |   | istop ← rows(F) - 1 if i + nCA > rows(F) - 1
                    |   |   | istop ← i + nCA otherwise
                    |   | sum ← 0
                    |   | ii ← istart
                    |   | while ii ≤ istop
                    |   |   | temp0 ← maxV
                    |   |   | temp1 ← dFii
                    |   |   | maxV ← max(temp)
                    |   |   | temp0 ← minV
                    |   |   | minV ← min(temp)
                    |   |   | ii ← ii + 1
                    |   | FFi ← min(Fi+1 - minVstep, Fi+1 - maxVstep) if i = 0
                    |   | otherwise
                    |   |   | FFi ← min(minVstep + Fi-1, maxVstep + Fi-1) if i = rows(F) - 1
                    |   |   | FFi ← min(min(Fi+1 - minVstep, minVstep + Fi-1), min(Fi+1 - maxVstep, maxVstep + Fi-1)) otherwise
                    |   | i ← i + 1
                    | FF
```

Рис.1. Представление алгоритм расчёта допустимого отклонений в САПР Mathcad (нижняя граница (верхняя граница рассчитывается симметрично)).
F – входной массив перемещений, dF – входной массив численных производных F, nCA – половина апертуры.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

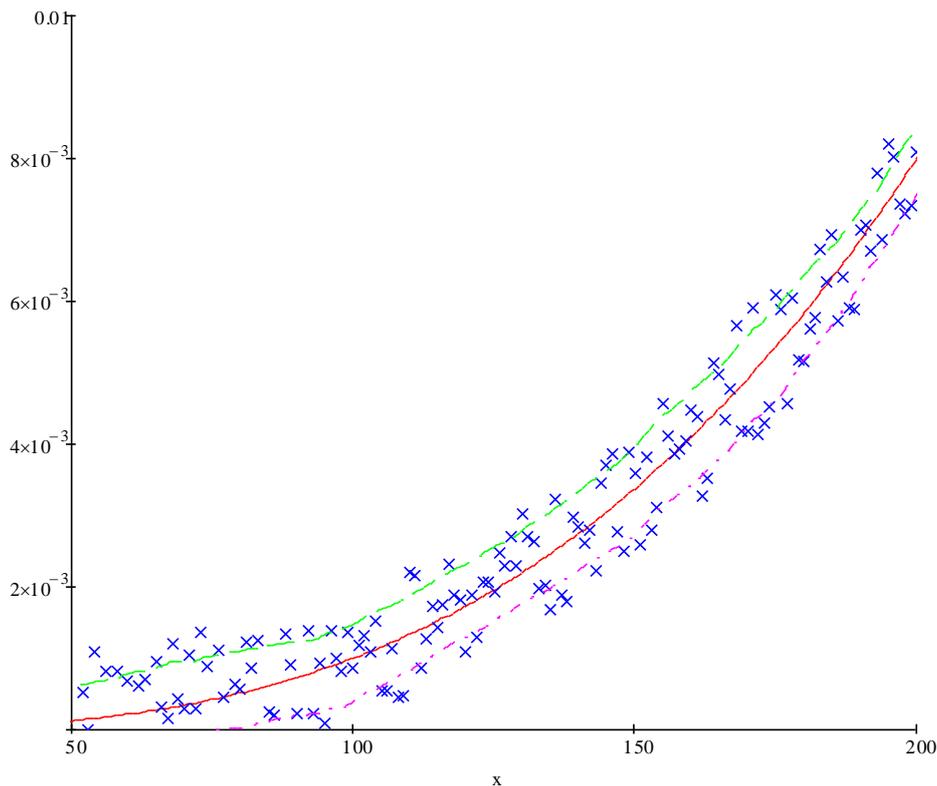


Рис.2. Иллюстрация применения алгоритма вычисления допустимых отклонений. Зависимость величины перемещения от координаты: красный – аналитическая величина перемещения; синий – зашумлённые величины перемещений; пурпурный – нижняя граница интервалов; зелёный – верхняя.

Был разработан алгоритм определения допустимых отклонений перемещений для учёта ошибок расчёта векторов перемещений, влияющих на измерения деформации на поверхности нагруженных материалов методом корреляции цифровых изображений. Данный алгоритм заключается в определении минимальных и максимальных отклонений величины рассчитываемого вектора перемещений по величине производной векторного поля в заданном окне (см. рис. 1). Применение данного алгоритма позволяет исключать из дальнейших расчётов перемещения, превышающие рассчитанные интервалы, или маркировать их и применять к ним алгоритмы коррекции (фильтрации, сглаживания и т.п.) (см. рис. 2).

Благодарности. Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований государственных академий наук (2013–2020 гг.) по теме 23.1.3, грантов Президента РФ № МК-6762.2018.9, № НШ-5875.2018.8, гранта РФФИ № 18-47-700006, гранта Российского научного фонда № 18-71-00087.

1. G. P. Cherepanov, Advances in Two-Dimensional and Three-Dimensional Computer Vision / Photomechanics, 77, 2000, pp. 323–372.
2. M. A. Sutton, J.-J. Orteu, H. Schreier. Image correlation for shape, motion and deformation measurements: basic concepts, theory and applications / Springer, 2009. 321 p.
3. Wang Y, Lava P, Reu P and Debruyne D 2015 Theoretical Analysis on the Measurement Errors of Local 2D DIC: Part I Temporal and Spatial Uncertainty Quantification of Displacement Measurements / Strain, 52(2), 2016, pp. 110–128.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации:

- материалы для авиакосмической и транспортной промышленности;
- материалы для ядерной энергетики;
- материалы для работы в условиях арктического климата;
- материалы для медицины.

DOI: 10.17223/9785946218412/162

УЛЬТРАЗВУКОВАЯ АГЛОМЕРАЦИЯ-ДРОБЛЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ АЛМАЗА

¹Кудряшова О.Б., ¹Верещагин А.Л., ¹Балахнина А.В., ¹Петров Е.А.

¹БТИ АлтГТУ, Бийск

Множество практических применений наноалмаза предполагает технологический этап введения таких частиц в жидкую среду. При этом частицы могут плохо смачиваться жидкостью. Агрегаты частиц представляют собой иерархическую наноструктуру, содержащую микро- и нанопоры, заполненные воздухом. Чтобы агрегаты разбились, а частицы равномерно распределились по объему жидкости, необходимо использовать внешнее воздействие. Часто для этих целей применяют ультразвуковую обработку суспензий. В других приложениях необходимо, наоборот, увеличить размер агрегатов в суспензии. Ультразвуковое воздействие может как разбить агрегат до первичных частиц, так и способствовать коагуляции и росту размеров агрегата. Цель данной работы заключается в поиске критерия дробление/коагуляция и описанию динамики поведения системы агрегат-наночастица-дисперсионная среда при ультразвуковой обработке.

Качественно влияние ультразвука на частицы в суспензии можно описать следующим образом.

Во-первых, ультразвук создает кавитацию в жидкости, что способствует проникновению в поры агломерата жидкости, даже при плохой смачиваемости поверхности [1, 2]. Этот процесс занимает некоторое время, которое можно оценить из решения задачи о капиллярном проникновении. При заполнении пор жидкостью и достижении на фронте волны некоторого критического значения давления, превышающего предел прочности агломерата, он разрушается – в пределе, до первичных наночастиц.

Во-вторых, ультразвук способствует более интенсивному перемещению частиц и столкновению их, что приводит к коагуляции и укрупнению агрегатов. Характерное время встреч частиц также можно оценить с учетом параметров акустической волны, концентрации частиц и др., пользуясь результатами классической работы [3].

Критерием ведущего механизма (дробление или агломерация) может служить отношение характерных времен процессов:

$$CF = \frac{t_c}{t_w} = \frac{pR_{cp}^2}{3E_p n_0 l_{cp}^2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \omega^2 \tau^2}} \right)^{-1},$$

где t_c – характерное время коагуляции частиц, t_w – характерное время смачиваемости (проникновения жидкости в поры), p – суммарное давление жидкости в поре-капилляре, R_{cp} – радиус капилляра, l_{cp} – его длина, n_0 – концентрация частиц в дисперсионной среде, E_p – кинетическая энергия движения частицы в ультразвуковом поле, ω – частота ультразвука, τ – время стоксовой релаксации частицы.

Если $CF < 1$, то в дисперсной системе будет происходить коагуляция частиц; в противном случае агломераты могут дробиться при дополнительном выполнении условия:

$$I \geq I_t = 2W_l \left(\frac{\sigma_{stp}}{D\omega\rho_l} \right)^2, \quad (1)$$

где I – интенсивность излучения, I_t – интенсивность излучения, при которой агломерат разрушается, σ_{stp} – предел прочности агломерата, D – его характерный размер, ρ_l – плотность жидкости, $W_l = \rho_l c$ – волновое сопротивление среды, c – скорость звука в жидкости.

В соответствии с выражением (1) находим минимальный размер частицы, до которого можно разбить агломерат при данном уровне интенсивности ультразвука:

$$D_{\min} = \frac{\sigma_{stp}}{\omega\rho_l} \sqrt{\frac{2W_l}{I}} \quad (2)$$

При $CF > 1$ и $I > I_t$ дробление частиц приводит к увеличению их счетной концентрации n_0 ($\sim 1/D^3$), а также к уменьшению диаметра частиц и величины E_p . Пороговая величина

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

интенсивности разрушения I_t также увеличивается, поэтому в какой-то момент дальнейшее разрушение частиц будет невозможно.

Даже если ведущим механизмом эволюции дисперсной системы является дробление ($CF > 1$), оно начнется не сразу, а спустя некоторое время, необходимое для пропитки пор агломератов жидкостью. В течение некоторого времени ультразвуковой обработки будет происходить коагуляция частиц. Динамика коагуляции в данной работе описывается с помощью модели Смолуховского с ядром уравнения, зависящим от параметров ультразвукового поля [4].

В работе проведен эксперимент по ультразвуковой обработке частиц нанодисперсного алмаза детонационного синтеза марки УДАГ (массовая доля 1 % в моторном масле). Частицы УДАГ плохо смачиваются маслом, поэтому в данной модели наблюдались оба механизма ультразвукового воздействия – в первые 10 минут агломерация, затем дробление вплоть до $D_{min} \sim 0,65$ мкм (2), далее размер частиц не изменялся (рис. 1).

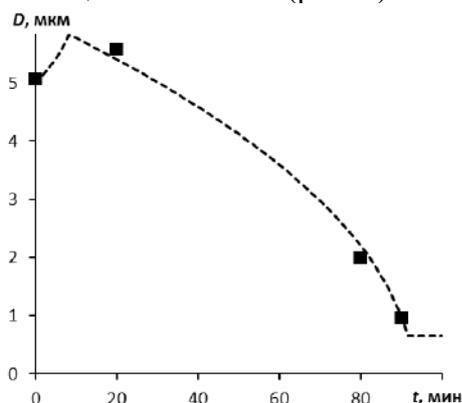


Рис. 1. Средний диаметр частиц УДАГ в суспензии в зависимости от времени ультразвуковой обработки: точки – эксперимент, кривая – расчет

Результаты эксперимента находятся в хорошем согласии с расчетными результатами. Были продемонстрированы все этапы взаимодействия ультразвука с частицами: вначале укрупнение, затем дробление вплоть до субмикронных размеров.

Полученные результаты позволяют прогнозировать поведение частиц в суспензии при обработке ультразвуком. Такая управляемая обработка может послужить основой для получения частиц (агрегатов частиц) необходимых размеров для конкретных технологических применений.

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-29-19070 мк.

1. Kudryashova Olga, Vorozhtsov Sergey On the Mechanism of Ultrasound-Driven Deagglomeration of Nanoparticle Agglomerates in Aluminum Melt // The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (JOM). 2016. Vol. 68, No. 5. P. 1307-1311.
2. Kudryashova O., Vorozhtsov S., Dubkova Ya., Stepkina M. Mechanisms of acoustic processing of a metal melt containing nanoparticles // AIP Conference proceedings. 2016. Vol. 1783. P. 020123-1 - 020123-4.
3. Rozenberg L. (ed.). High-intensity ultrasonic fields. – Springer Science & Business Media, 2013.
4. Kudryashova, O., Korovina, N., Akhmadeev, I., Muravlev, E., Titov, S., & Pavlenko, A. Deposition of Toxic Dust with External Fields // Aerosol and Air Quality Research. 2018. V. 18. P. 2575-2582.

DOI: 10.17223/9785946218412/163

EFFECT OF ELASTIC GRADING ON FRETTING WEAR

¹Willert E., ^{1,2}Popov V.L., ^{2,3}Dmitriev A.I., [†]Psakhie S.G.

¹*Technische Universität Berlin, Berlin, Germany*

²*National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia*

³*Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia*

Fretting wear and fatigue represent a considerable problem in applications using frictional contacts subjected to vibrations as e.g. fretting of tubes in steam generators, joints in orthopaedics and dovetail blade roots of gas turbines. The physical reason for the fretting is partial sliding in the vicinity of boundary of a frictional contact. Tangential oscillations without slip would cause a stress singularity at the contact boundary; hence, for any finite coefficient of friction, there will be some slip region in the vicinity of the contact boundary. This partial slip and the resulting fretting wear can only be prevented by using a contact with sharp edges. However, in this case, both normal and tangential stresses will be singular at the boundary and oscillating stresses will lead to fretting fatigue. Thus, applications with frictional contacts under vibrations should find an optimal path between Scylla of fretting wear and Charybdis of fretting fatigue.

A possible solution of the wear/fatigue dilemma may be the use of functionally graded materials (FGM). The problem of fretting wear is due to the interplay of normal and tangential stresses. The distribution of the normal stresses is, however, governed by deeper parts of the material compared with tangential stress components. Changing the elastic modulus of the surface layer of the material or – more generally – introducing material gradients could help solving the dilemma.

Compared with other publications in the field, we concentrate our attention on the final shape which develops due to fretting wear and investigate this shape for power-law graded materials. We try to find the answer to the question, if it is possible to reduce or even completely exclude fretting wear by introducing gradients of elastic moduli.

The central idea of our approach to determine the limiting worn profile is very simple and robust. In [1], it was shown that, if two bodies are pressed against each other and subjected to small-amplitude tangential oscillations, the worn profile, independently of the particular wear or friction law, develops in time tending to some limiting shape, if the following assumptions are met:

- All deformations are predominantly elastic.
- Wear only occurs in the contact areas with non-vanishing relative displacement.
- Wear only occurs in the contact areas with non-vanishing pressure.
- The law of friction allows for the existence of a region of permanent stick.

Here we apply the idea introduced in [1] to analyse the limiting fretting shape of graded materials. We consider a contact of an axisymmetric rigid indenter with an elastic half-space, whose Young's modulus varies with depth according to the power law

$$E(z) = E_0 z^k, \quad -1 < k < 1, \quad (1)$$

where z is the vertical coordinate measured from the surface, E_0 is an arbitrary positive constant and k is the exponent ($k = 0$ corresponds to a homogeneous material).

As the final worn shape has to be achieved due to wear, the limiting profile of the indenter must exactly coincide with the form of the free surface produced by the initial indenter shape inside the permanent stick region. Thus, in the final state, in the slip region, the indenter and the elastic half space will be finally in the state of “incipient contact”. This logic does not depend on whether the material is homogeneous or heterogeneous, and it is not confined to axisymmetric contact configurations: The final worn shape is basically determined by the solution of the normal contact problem under the action of the profile defined only in the permanent stick region.

Fig. 1 shows the limiting profile shape in normalized variables for different values of k . The profile has been normalised for the indentation depth and the radial coordinate for the initial contact radius in the homogeneous case. In these variables the limiting profile only depends on k and the normalized fretting amplitude. We can easily recognize several features: first the contact radius is increasing with increasing k ; second the slip area is propagating slower from the edge of contact

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

inside with increasing k ; finally the worn volume seems to decrease with increasing k . This, however, is only a part of the complete picture which is presented in detail in Fig. 2 (a,b) in form of “wear maps”. In these figures the total wear volume, normalized for the value in the homogeneous case, as a function of the two remaining parameters, the exponent k and the normalized fretting amplitude, is shown in contour isoline plots; the left hand side diagram (a) gives the semi-analytic solution based on the exact contact mechanical description, and the right hand side figure (b) shows the closed-form asymptotic solution for small fretting amplitudes.

For intermediate and large fretting amplitudes it is obviously beneficial to use a graded material with positive exponent k , i.e. a soft surface with a hard core. For negative k , i.e. hard surfaces, the wear volume is drastically increased. However, for very small oscillation amplitudes, it might be beneficial to use a grading with slightly negative k . Note, nonetheless, that the contact stresses in the case of negative elastic grading can be significantly increased if the hard surface is very thick and the soft core is isolated from carrying a relevant amount of the load. This will accelerate the wear process (although without changing the limiting profile if the indentation depth is prescribed) and may enhance fretting fatigue.

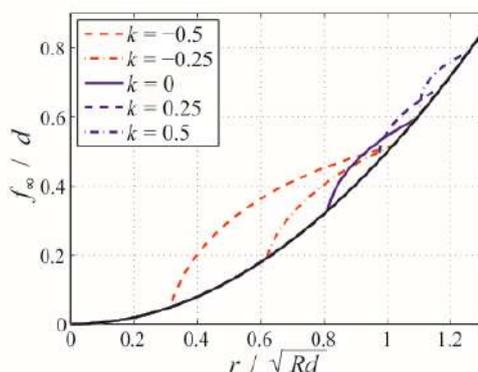


Fig. 1 Limiting profile shape after fretting normalized for the indentation depth as a function of the normalized polar radius for a parabolic indenter with radius R for different values of exponent k of the power-law grading. Normalized fretting amplitude is 0.5. Black line denotes the unworn profile.

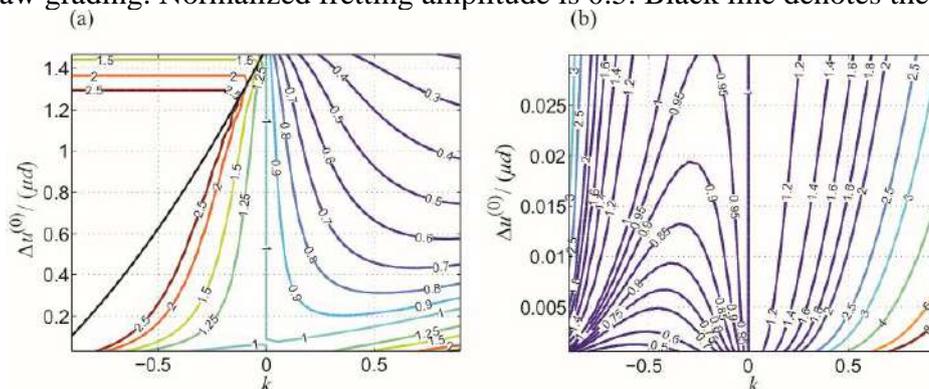


Fig. 2 Contour isoline plots of the total worn-off volume normalized for the value in the homogeneous case for the fretting wear of a parabolic indenter on a power-law graded elastic half-space as a function of the exponent of elastic grading k and the normalized fretting amplitude. (a) Semi-analytic solution; black line denotes the transition to complete sliding. (b) Asymptotic solution for small fretting amplitudes.

1. Popov V.L. Analytic solution for the limiting shape of profiles due to fretting wear // Scientific Reports. 2014. № 4. 3749. DOI: 10.1038/srep03749.

DOI: 10.17223/9785946218412/164

ОСОБЕННОСТИ АДсорбЦИИ НАНОЧАСТИЦ НА ПОВЕРХНОСТИ ИЕРАРХИЧЕСКИ ОРГАНИЗОВАННЫХ НАНОСТРУКТУР АLOOH В ДИНАМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

Ложкомоев А.С.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Изучение особенностей адсорбции различных объектов в динамических условиях на поверхности иерархически организованных структур является перспективным направлением в области разработки современных технологий очистки жидкостей от различных примесей. В работе рассмотрены особенности адсорбции неорганических ионов, крупных органических молекул, а также бактерий и вирусов при пропускании воды через слой волокнистого сорбционного материала. Волокнистый сорбционный материал представляет собой полимерные микроволокна диаметром около 1,5 мкм, которые покрыты складчатыми нанолитовыми структурами бимита (см рис. 1). Для исследуемых адсорбатов были построены динамические кривые адсорбции, показано, что ёмкости до проскока ионов NO_3^- и H_2AsO_4^- составили 0,16 мг/г и 0,47 мг/г, соответственно. Анионного красителя эозина до проскока адсорбировалось 3,5 мг/г, молекул таниновой кислоты 20,9 мг/г. Количество адсорбированных бактерии (*E.coli*) до появления в фильтрате составило 10^{11} КОЕ/г, а бактериофага MS2 – 10^9 БОЕ/г. Таким образом, живые культуры микроорганизмов при фильтровании через волокнистый сорбент «проскакивают» при концентрациях в $10^5 \dots 10^{10}$ раз меньших, чем молекулярные и ионные адсорбаты. Это частично связано с большей чувствительностью биологических методов анализа, а также, возможно, с другим, более дальнедействующим – кулоновским механизмом адсорбции.

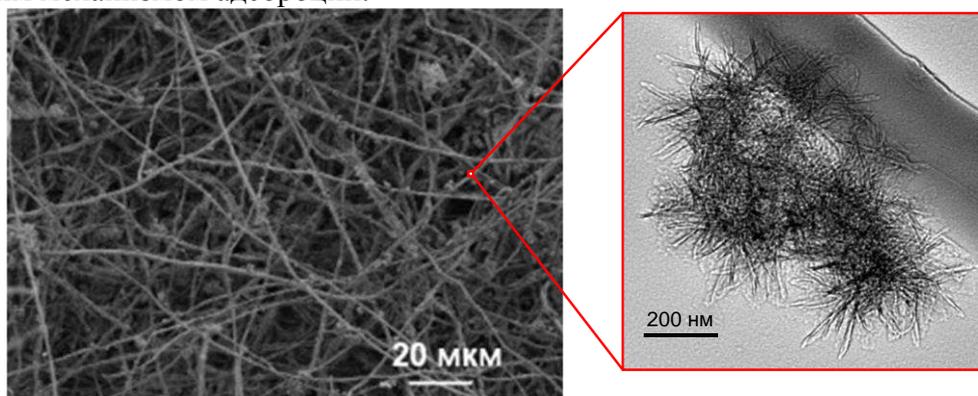


Рис. 1. Электронно-микроскопические изображения фрагментов волокнистого сорбента

Были проведены оценки влияния кулоновского взаимодействия при адсорбции частиц в динамических условиях на поверхности волокнистого сорбента. Показано, что кулоновское взаимодействие наночастицы с заряженной поверхностью даже на расстоянии 100 нм значительно сильнее, чем другие составляющие.

Исследования проведены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/165

МНОГОУРОВНЕВАЯ ИЕРАРХИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА СИЛУМИНА, ПОДВЕРГНУТОГО МНОГОЦИКЛОВОМУ ПОВЕРХНОСТНОМУ ЛЕГИРОВАНИЮ

Иванов Ю.Ф., Лопатин И.В., Петрикова Е.А., Рыгина М.Е., Толкачев О.С.

Институт сильноточной электроники Сибирского отделения РАН, Томск

Силумином принято называть сплавы алюминия с кремнием, содержание которого в готовом изделии, как правило, изменяется в пределах от 4 % до 22 % от общего объема. Силумин является одним из наиболее востребованных сплавов на основе алюминия. Низкая стоимость в сочетании с технологичностью дает возможность широко применять силумины в промышленности, а именно, в машиностроении (поршни, детали для корпуса, цилиндры двигателя), авиастроении (блоки цилиндров, поршни для охлаждения, авиационные узлы), космонавтике (детали с низким значением температурного коэффициента линейного расширения и высоким уровнем механических свойств), газотурбинном оборудовании (генераторы, теплообменники) и многое другое. Служебные характеристики силумина во многом определяются концентрацией в сплаве кремния. Чем больше процент содержания кремния, тем более твердым и износоустойчивым получается сплав, но при этом повышается хрупкость материала. Последнее обусловлено формированием на стадии кристаллизации заготовки или изделия включений кремния и интерметаллидов больших (сотни микрометров) размеров, присутствие микро- и макропор [1].

Целью настоящей работы является разработка методики кратного повышения механических и трибологических свойств сплава Al-Si, заключающаяся в многоцикловой обработке в едином вакуумном пространстве поверхностного слоя материала, сочетающей в одном цикле формирование системы «пленка (металл)/(силумин) подложка» и последующее облуживание поверхности интенсивным импульсным электронным пучком.

Выбранный для исследований сплав Al-Si (АК12; ГОСТ 1583-93) относится к эвтектическим и имеет следующий химический состав (вес. %): Al -(10-13)Si -до 1.5Fe -до 0,5Mn -до 0.1Ti -до 0.6Cu -до 0,1Zr -до 0,1Mg –до 0,3Zn. Образцы имели форму пластинок размерами 20x20x8 мм. Перед модифицированием (далее по тексту: «исходное состояние») сплав находился в литом (литье в кокиль) состоянии. Эксперименты проводили на установке «КОМПЛЕКС» (ИСЭ СО РАН), позволяющей реализовывать в едином вакуумном пространстве следующие виды обработки поверхности в разных комбинациях: ионная очистка и нагрев в аргоновой плазме несамостоятельного дугового разряда с накаливаемым и полым катодом с подачей отрицательного смещения на образец (начальный нагрев образцов до заданной температуры, очистка и активация обрабатываемой поверхности); плазмо-ассистированное электродуговое нанесение металлических (при использовании аргоновой плазмы) пленок или керамических твердых и сверхтвердых покрытий; электронно-пучковая обработка с использованием низкоэнергетичного интенсивного импульсного электронного пучка микро- субмиллисекундной длительности; насыщение поверхностного слоя модифицируемого материала газовыми элементами (азот, углерод, кислород).

Исследование структуры силумина в исходном состоянии и после модифицирования осуществляли методами рентгеноструктурного анализа (дифрактометр XRD 6000), оптической (Микровизор металлографический μ Vizo-MET-221), сканирующей (прибор SEM 515 Philips) и просвечивающей дифракционной (прибор JEM-2100F) электронной микроскопии. Анализ элементного состава образцов осуществляли методами SEM/EDAX (микрорентгеноспектральный анализ, микроанализатор EDAX ECON IV, установленный на сканирующем электронном микроскопе SEM 515 Philips). Свойства модифицированного слоя характеризовали, определяя микротвердость (прибор ПМТ-3, нагрузка на индентор 0,5 Н) и износостойкость (прибор TRIBOtechnik; условие сухого трения при комнатной температуре, контртело – шарик ШХ15 диаметром 6 мм, радиус трека 2 мм, скорость вращения образца 2,5 см/с, нагрузка на индентор 5 Н, количество оборотов 8000). Износостойкость поверхностного слоя материала рассчитывали после проведения профилометрии образовавшегося трека.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Установлено, что сплав АК12 в литом состоянии является многоэлементным многофазным материалом, характеризующимся присутствием крупных кристаллов кремния и включений интерметаллидов преимущественно пластинчатой (игольчатой) формы микронных и субмикронных размеров (рис. 1, а). Наличие таких включений является основной причиной весьма низкой пластичности данного материала.

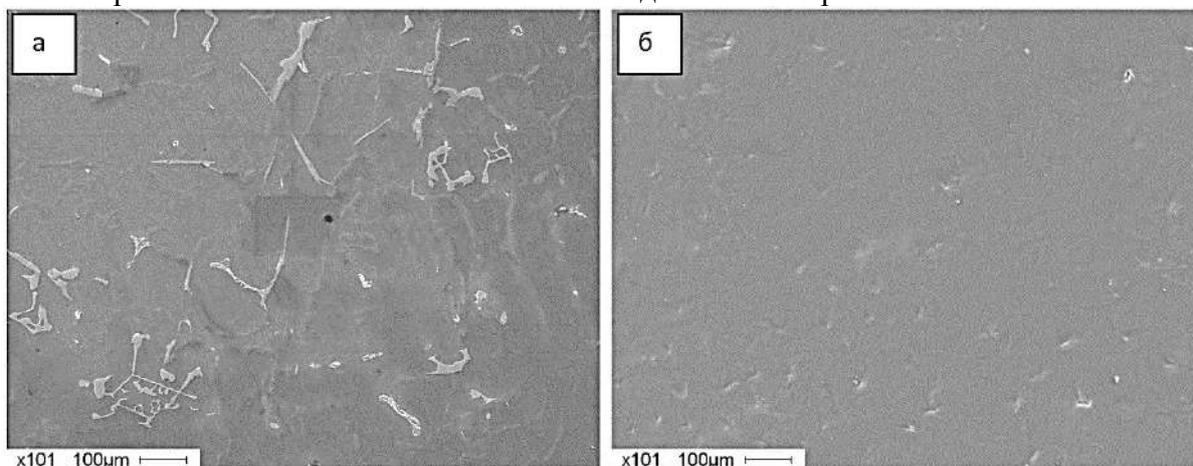


Рис. 1. Структура силумина АК12 в литом состоянии (а) и после многоциклового (5 циклов) обработки (б)

Показано, что многоцикловое легирование силумина титаном сопровождается растворением в поверхностном слое толщиной до 50 мкм включений литой структуры (рис. 1, б), формированием алюминидов титана состава $TiAl$ и $TiAl_3$, относительное содержание которых зависит от количества циклов и достигает 56 масс. %. Формирующаяся структура является субмикро- нанокристаллической, размер кристаллитов которой увеличивается по мере удаления от поверхности модифицирования (рис. 2).

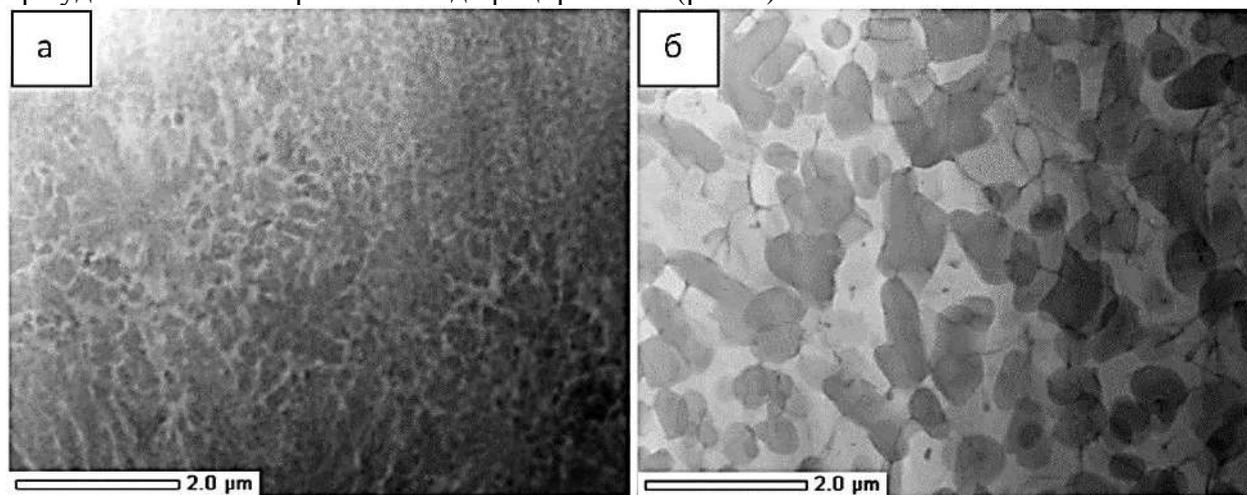


Рис. 2. Структура поверхностного слоя (а) и слоя, расположенного на глубине 30 мкм (б), силумина АК12 после многоциклового (10 циклов) обработки

Установлено, что износостойкость модифицированного силумина достигает максимальных значений поле пяти циклов обработки и превышает износостойкость литого силумина более чем в 14 раз.

1. Золотаревский В.С., Белов Н.А. Металловедение литейных алюминиевых сплавов. М.: МИСиС, 2005. – 376 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/166

**ПРИМЕНЕНИЕ ИЕРАРХИЧЕСКИ ОРГАНИЗОВАННОГО НАНОСТРУКТУРНОГО
ОКСИГИДРОКСИДА АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ОСТАНОВКИ КРОВОТЕЧЕНИЙ**

Ложкомоев А.С.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Перспективными материалами для изменения параметров биологических жидкостей являются иерархические пористые наноструктуры на основе оксидов металлов, что обусловлено их развитой поверхностью, положительному заряду и селективными сорбционными свойствами. Благодаря этим свойствам такие структуры способны изменять количество катионов и анионов, рН и электрокинетических потенциал биологических жидкостей. Как известно, свертывание крови это совокупность биофизических, биохимических процессов, обеспечивающих переход крови из жидкого состояние в твердое. При этом образование фибринового сгустка зависит от ряда переменных, включая рН, ионную силу, концентрацию ионов кальция и белков: фибриногена, тромбина.

Таким образом, пористые иерархически организованные наноструктуры на основе оксидов металлов могут быть перспективными для применения в качестве гемостатических агентов. В нашей работе были проведены исследования по остановке капиллярного и паренхиматозного кровотечения на лабораторных животных самцах белых крыс породы Vistar с использованием пористых наноструктур бемита (AlOOH). Было установлено, что время остановки паренхиматозного кровотечения при использовании наноструктур AlOOH составило 83 ± 6 с, при этом в контрольной группе время остановки паренхиматозного кровотечения составило 153 ± 14 с. Масса кровопотери в контрольной группе составила $0,74 \pm 0,11$ г, в группе, где рану обрабатывали наноструктурами бемита – $0,37 \pm 0,9$ г. При исследовании гемостатического действия наноструктур AlOOH при капиллярном кровотечении было установлено, что время остановки кровотечения составило 105 ± 8 с, при этом в контрольной группе время остановки кровотечения составило 216 ± 18 с. Масса кровопотери в контрольной группе составила $1,86 \pm 0,19$ г, в группе, где кончик хвоста обрабатывали наноструктурами бемита – $0,72 \pm 0,14$ г.

Проведенные исследования показали, что синтезированные наноструктуры бемита оказывают гемостатическое действие в экспериментах *in vivo* на моделях капиллярного и паренхиматозного кровотечениях и могут быть использованы для создания местных гемостатических средств на их основе.

Работы выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.604.21.0156, идентификатор проекта RFMEFI60417X0156).

DOI: 10.17223/9785946218412/167

**О СОВЕРШЕНСТВОВАНИИ ОЦЕНКИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ
НАПОЛНЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ ПО ТЕКСТУРНОЙ КАРТИНЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ
МАКРОСТРУКТУРЫ**

¹Минакова Н.Н., ²Ушаков В.Я.

¹*Алтайский государственный университет, Барнаул*

²*Томский политехнический университет, Томск*

Электропроводящие полимерные композиционные материалы активно применяются для изготовления антистатических изделий, заземляющих устройств, экранов кабелей и т.д. [1]. Появляются и новые области использования, например, в биометрических устройствах. Электропроводность определяется характером распределения наполнителя в матрице. Поэтому поиск нового инструментария для оценки величины электропроводности таких материалов является актуальным.

В работе [1] показано, что оценку электропроводности наполненных полимеров можно выполнить по изображениям их макроструктуры, в частности, по энтропии текстурного признака, отражающей взаимное расположение частиц наполнителя и матрицы. Для ее определения была разработана специальная методика обработки изображений, включающая подбор порога отсечки для перевода в черно-белое изображение, размер области, в пределах которой рассчитывалось единичное значение текстурного признака. Такая подстройка параметров для обработки изображения усложняет применение метода.

В докладе рассматривается упрощенный подход к оценке характеристик изображений макроструктуры наполненных полимеров. Применены модели, используемые для анализа цветового пространства с автоматическим подбором параметров обработки изображений: модель YUV и метод Оtsu [2]. На их основе разработана программа обработки изображений. Численные эксперименты выполнялись для материалов, отличающихся концентрацией электропроводящего наполнителя (технического углерода). Матрица – бутилкаучук БК-2055.

Выбран комплекс параметров, характеризующих текстурную картину изображения макроструктуры. Для изучения взаимосвязи «структура – свойства» текстурные параметры сопоставлялись с величиной удельного объемного электрического сопротивления (ρ_v), коэффициентом вариации этой величины в серии изделий (k , %), температурным коэффициентом сопротивления ТК ρ_v .

Выявлены текстурные параметры, которые монотонно меняются в зависимости от концентрации наполнителя в материале. Закономерность не зависит от величины окна, используемого при оценке параметров. Установлена корреляционная связь между выбранными электрофизическими характеристиками и параметрами текстурной картины изображения макроструктуры.

Диапазон изменения ρ_v , k , ТК ρ_v при изменении концентраций наполнителя сопоставлялся с диапазоном изменения каждого из рассматриваемых текстурных признаков. Текстурные признаки расклассифицированы применительно к рассматриваемым электрофизическим характеристикам.

Показано, что комплекс параметров текстурной картины изображения макроструктуры могут быть использованы для прогнозных оценок величины электропроводности наполненных полимеров.

1. Минакова Н.Н., Ушаков В.Я. Физико-технические основы создания высоконаполненных эластомеров и управления их резистивными свойствами. - М.: Энергоатомиздат, 2003. – 260 с.

2. URL: <http://www.labbookpages.co.uk/software/imgProc/otsuThreshold.html>. [Электронный ресурс]. (дата обращения 05.05.2019)

DOI: 10.17223/9785946218412/168

**ПРИМЕНЕНИЕ ПОКАЗАТЕЛЯ ХЕРСТА ДЛЯ ОЦЕНКИ ПОВЕДЕНИЯ
НАПОЛНЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ В АГРЕССИВНЫХ СРЕДАХ**

Минакова Н.Н., Мансуров А.В.

Алтайский государственный университет, Барнаул

Наполненные электропроводящие полимеры работают в агрессивных средах, различных температурных режимах и т.д. При разработке материалов обычно оценивается стабильность электропроводности по величине ее изменения за определенный период времени при воздействии дестабилизирующего фактора [1]. Актуален поиск новых способов анализа характеристик, позволяющих получить дополнительную информацию о поведении материалов в агрессивных средах.

Представляло интерес предложить и апробировать подход к оценке не только величины изменения электропроводности, но и характера самого временного процесса.

В докладе анализируется поведение наполненных техническим углеродом каучуков в агрессивных средах, которые могут быть рабочей средой при различных применениях. Например, анализ работы в агрессивной химической среде требуется для протонпроводящих мембран – ключевого и очень важного компонента топливного элемента.

Для оценки характера изменения электропроводности во времени при воздействии агрессивной среды применен показатель Херста. Среди методов определения показателя Херста выбран метод нормированного размаха – R/S анализ [2].

Разработана программа ЭВМ, с помощью которой рассчитывался показатель Херста, строился график логарифмической зависимости нормированного размаха R/S от времени.

Показатель рассчитывается по двум вариантам:

1) «random_walk», где серия данных рассматривается как случайное блуждание со случайными приращениями (используется для временных рядов со скачкообразными изменениями, благодаря сглаживанию графика при подсчете отклонения от среднего значения);

2) «change» - считается, что ряд состоит из случайных приращений (используется для временных рядов с плавными близкими между собой изменениями).

Были проведены численные эксперименты по анализу изменения величины сопротивления во времени при нахождении материалов в агрессивной среде. В докладе приведены результаты анализа временных рядов в воздухе, трансформаторном масле, толуоле. Эксперименты приводились при изменении следующих факторов: временной интервал для оценки, количество образцов для исследования, состав материалов, способ аппроксимации экспериментальных данных (random_walk, change).

Установлено, что для выбранных объектов исследования временная зависимость в рассматриваемом диапазоне концентраций наполнителя может быть как персистентной, так и антиперсистентной.

Полученные данные позволяют сделать вывод о том, что определение показателя Херста как одного из параметров устойчивости временного ряда. может быть использовано в качестве дополнительного инструмента для исследования поведения электропроводящих наполненных полимеров в агрессивных средах. Выявленная возможность наличия трендов должна учитываться при конструировании материалов под заданную область применения при работе в длительном временном режиме.

1. Минакова Н.Н., Сквирская И.И., Ушаков В.Я. Высоковольтные характеристики материала на основе каучука с углеродным наполнителем для объемных резисторов. //Электричество. 1986, № 5, С. 59-60.
2. Hurst H.E., Black R.P., Simaika Y.M. Long-term storage: An experimental study. London: Constable, 1965. 145 p.

DOI: 10.17223/9785946218412/169

ДВОЙНОЙ ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ И ЕГО ЦИКЛИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ В [001]- МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Co_{49}Ni_{21}Ga_{30}$

Куксгаузен И.В., Победенная З.В., Куксгаузен Д.А., Чумляков Ю.И., Киреева И.В.,
Бессонова И.Г., Кириллов В.А.

*Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Сибирский физико-технический институт, Томск*

На однофазных [001]- ориентированных монокристаллах ферромагнитного сплава $Co_{49}Ni_{21}Ga_{30}$ (ат.%,%) испытывающего В2-L1₀ мартенситное превращение (МП), исследован двойной эффект памяти формы (ДЭПФ) и стабильность ДЭПФ в циклах охлаждения/нагрев через температуры МП в свободном состоянии. Исследования ДЭПФ проводили в следующих состояниях: 1. после отжига при температуре 1423 К в течение 30 минут с последующей закалкой в воду, и 2. тренировки: охлаждения под различным уровнем сжимающих напряжений σ от 0 до 250 МПа и последующего нагрева в свободном состоянии. Выбранные [001]- ориентированные кристаллы имеют максимальное значение теоретического ресурса деформации превращения ε_0 в сплавах $Co_{49}Ni_{21}Ga_{30}$ (ат.%,%) при В2-L1₀ МП при сжатии, который равен 4.5 %. Электронно-микроскопические исследования показали, что после закалки от 1423 К монокристаллы при комнатной температуре имеют однофазную В2-структуру.

Установлено, что до тренировки при охлаждении/нагреве в температурном интервале 77-373 К в отсутствии приложенных напряжений изменение размеров образца не наблюдается, следовательно, ДЭПФ не реализуется. In-situ наблюдения в колонне микроскопа показали, что при охлаждении ниже температуры начала прямого МП $M_s=260$ К, определенной методом дифференциально-сканирующей калориметрии, в кристаллах до тренировки наблюдается самоаккомодирующая структура L1₀- мартенсита. После тренировки под $\sigma=30$ МПа при охлаждении ниже $M_s=262$ К в свободном состоянии происходит самопроизвольное уменьшение размеров образца, а после нагрева выше температуры конца обратного МП $A_f=280$ К их полное восстановление. Следовательно, в результате тренировки создаются условия для реализации ДЭПФ, величина которого $\varepsilon_{дэпф}$ составила 1.9(± 0.2) %. С увеличением напряжений в тренировочном цикле до $\sigma=125$ МПа величина $\varepsilon_{дэпф}$ растет и достигает максимального значения 4.2(± 0.2) %. Значение $\varepsilon_{дэпф}=4.2(\pm 0.2)$ % по величине равно ε_0 для [001] кристаллов при В2-L1₀ МП при сжатии. После тренировки при напряжениях выше 125 МПа величина ДЭПФ уменьшается. В отличие от нетренированного образца, в кристалле после тренировки под $\sigma=125$ МПа при in-situ охлаждении ниже M_s наблюдается зарождение и распространение преимущественно одного ориентированного варианта L1₀- мартенсита. При реализации ДЭПФ независимо от уровня напряжений в тренировочном цикле, В2-L1₀ МП характеризуется узким температурным гистерезисом $\Delta T=M_s-A_f=15-20$ К и малыми величинами переохлаждения Δ_1 и перегрева Δ_2 : $\Delta_1=\Delta_2=2-3$ К.

Физическая природа ДЭПФ, наблюдаемого в однофазных [001]- кристаллах, связана с появлением остаточного ориентированного L1₀-мартенсита, который наблюдается оптически на поверхности тренированного образца. Остаточный мартенсит способствует возникновению внутренних далекодействующих ориентированных полей напряжений, что в свою очередь приводит к появлению ДЭПФ.

В кристаллах после тренировки под $\sigma=125$ МПа с максимальной величиной $\varepsilon_{дэпф}$ до 150 циклов охлаждения/нагрева через температуры МП в свободном состоянии изменение величины обратимой деформации при реализации ДЭПФ и температуры M_s не происходит. Деградация ДЭПФ (снижение температуры M_s и уменьшение обратимой деформации $\varepsilon_{дэпф}$) наблюдается с 150 по 300 цикл термоциклирования. Деформация ДЭПФ $\varepsilon_{дэпф}$ уменьшается в 1.2 раза (с 4.1% до 3.5%), а температура M_s снижается на 9 К (с 251 К до 242 К). Предполагается, что деградация ДЭПФ при термоциклировании может быть связана с увеличением объемной доли остаточного L1₀-мартенсита.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ мол_а № 18-33-00101.

DOI: 10.17223/9785946218412/170

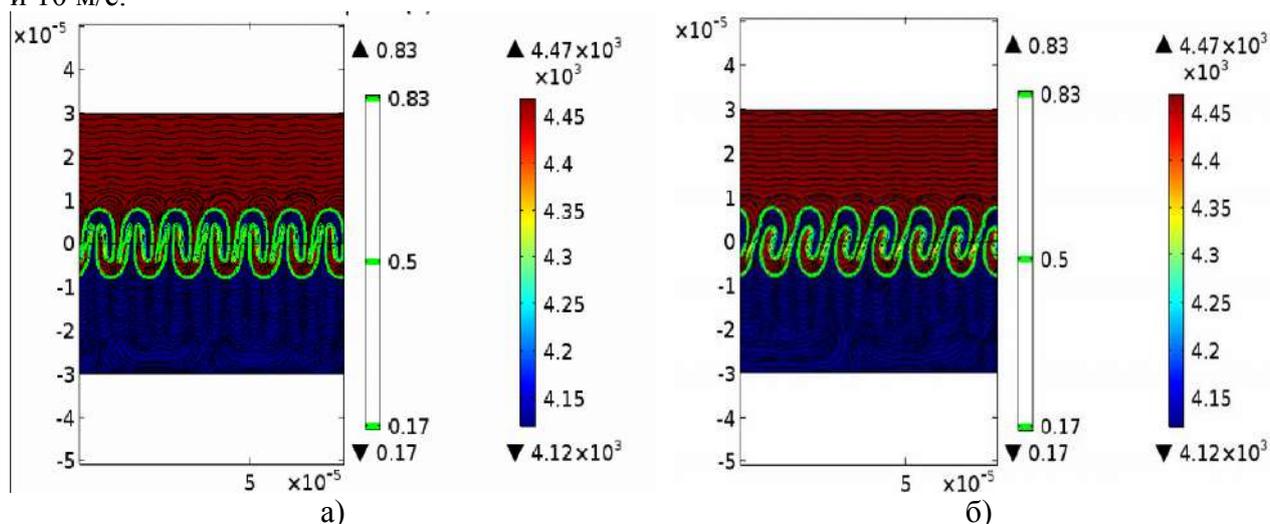
РОЛЬ КОМБИНИРОВАННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ РЭЛЕЯ-ТЕЙЛОРА И КЕЛЬВИНА-ГЕЛЬМГОЛЬЦА В ОБРАЗОВАНИИ РЕЛЬЕФА ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ПОКРЫТИЕ/ПОДЛОЖКА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ГЕТЕРОГЕННЫХ ПЛАЗМЕННЫХ ПОТОКОВ

¹Невский С.А., ¹Сарычев В.Д., ¹Грановский А.Ю. ²Коновалов С.В., ¹Громов В.Е.

¹Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк

²Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королева, Самара

Для защиты поверхности изделий от износа в настоящее время все большее применение находят композиционные покрытия, которые обладают высокой твердостью и износостойкостью. На сегодняшний день разработано много методов нанесения покрытий на поверхность изделий ответственного назначения, из которых следует отметить такие, как гетерогенные плазменные потоки, созданные электрическим взрывом проводников. Преимуществом нанесения покрытий с помощью гетерогенных плазменных потоков, полученных путем электрического взрыва проводников, является то, что данный метод позволяет получить покрытия, обладающие большим сопротивлением процессу изнашивания за относительно короткое время (~100 мкс). При нанесении покрытий нельзя игнорировать факт их отслоения от подложки в процессе эксплуатации. Одной из причин отслоения покрытий является возникновение при контактной нагрузке на границе покрытия и подложки механических напряжений вследствие несоответствия их модулей упругости. Немаловажную роль играет геометрия поверхности раздела, которая приводит к перераспределению концентраторов напряжений, что позволяет сохранять функциональные свойства покрытия без формирования протяженных полос локализованной пластичности в матрице. Для обеспечения развитого рельефа поверхности раздела покрытие/подложка необходима информация о режимах обработки гетерогенными плазменными потоками, при которых получается данный рельеф. В этой связи особую актуальность приобретают исследования, посвященные поиску механизмов формирования рельефа поверхности при данном виде воздействия. В настоящей работе предложена модель формирования рельефа границы раздела «покрытие/подложка», которая основана на представлениях о том, что этот процесс является результатом взаимодействия неустойчивостей Рэля-Тейлора и Кельвина-Гельмгольца. На рисунке 1 представлено картина течения системы Ti-Y при значении поперечных скоростей 5 и 10 м/с.



Из данного рисунка следует, что при значении скорости меньше 10 м/с преобладает неустойчивость Рэля-Тейлора, тогда как при $u_0 > 10$ м/с тип неустойчивости меняется.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования № 3.1283.2017/4.6 и гранта Президента для государственной поддержки молодых ученых МК-118.2019.2.

DOI: 10.17223/9785946218412/171

ВЛИЯНИЕ КОМБИНИРОВАННОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ СИЛУМИНА АК10М2Н

Шляров В.В., Загуляев Д.В., Рубанникова Ю.А., Громов В.Е.

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк

Модификация структуры, механических и физических свойств конструкционных материалов является основной задачей современной промышленности. Воздействие концентрированными потоками энергии (КПЭ) на поверхность конструкционных материалов для улучшения механических и физических характеристик является перспективным направлением современных исследований [1 – 3]. Используя методы КПЭ можно добиться кратного повышения механических свойств материалов. Однако при современных темпах роста производства машин и механизмов этого оказалось не достаточно, поэтому появляются способы энергетического воздействия, включающие в себя два и более метода поверхностной или объемной обработки материалов. Примером подобных технологий можно привести плазменное напыление коррозионностойких покрытий с дальнейшей лазерной обработкой [4] или электронно-лучевой переплав износостойких покрытий, нанесенных методом высокоскоростного напыления [5].

Целью данной работы является исследование структуры и микротвердости силумина марки АК10М2Н, подвергнутого комплексной обработке электровзрывным легирование с последующей электронно-пучковой обработкой.

Методами современного физического материаловедения выполнен анализ изменения структуры и механических свойств доэвтектического силумина марки АК10М2Н после комплексной обработки. Образцы имели форму параллелепипеда со сторонами 20×20×10 мм. В качестве материала покрытия, использовали порошок оксида иттрия Y_2O_3 .

Образцы силумина подвергались комплексной обработке. Первый этап: нанесение композиционного покрытия системы $Al - Y_2O_3$ методом электровзрывного легирования (ЭВЛ) на установке ЭВУ 60/10. Масса алюминиевой фольги, на которую помещался порошок Y_2O_3 , не изменялась во всей серии испытаний и составляла 0,0589 г. На втором этапе на получившееся покрытие воздействовали интенсивным импульсным электронным пучком с параметрами: энергия ускоренных электронов 17 кэВ, плотность энергии пучка электронов 25 Дж/см² и 35 Дж/см², длительность импульса пучка электронов 150 мкс, количество импульсов 3. Модификацию поверхности производили с помощью установки «СОЛО». Режимы комплексной обработки представлены в таблице 1.

Таблица 1. Режимы комплексной обработки.

№ режима	Масса порошка Y_2O_3 , г	Напряжение разряда, кВ	Плотность энергии пучка электронов, Дж/см ²	Энергия ускоренных электронов, кэВ	Длительность импульса пучка электронов, мкс	Количество импульсов
1	0,0589	2,8	25	17	150	3
2	0,0883	2,6				
3	0,0589	2,8	35			
4	0,0883	2,6				

Исследования структуры, а также анализ фазового состава модифицированного слоя осуществляли методами сканирующей электронной микроскопии (микроанализатор EDAX ECON IV, являющийся приставкой к электронному сканирующему микроскопу SEM-515 «Philips»). Приведенные в данной работе фотографии выполнены во вторичных электронах, в режиме, наиболее близком к оптическому изображению.

Для оценки прочности материала оперировали понятием микротвердости. Измерения микротвердости проводили по методу Виккерса, в соответствии с требованиями ГОСТ 9450-76, нагрузка на индентор составляла 50 мН (микротвердомер HVS – 1000).

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Структуру и фазовый состав модифицированного слоя изучали путем исследования поперечных шлифов. Анализируя результаты, представленные на рис. 1, можно отметить, что толщина модифицированного слоя изменяется в пределах от 50 мкм до 70 мкм.

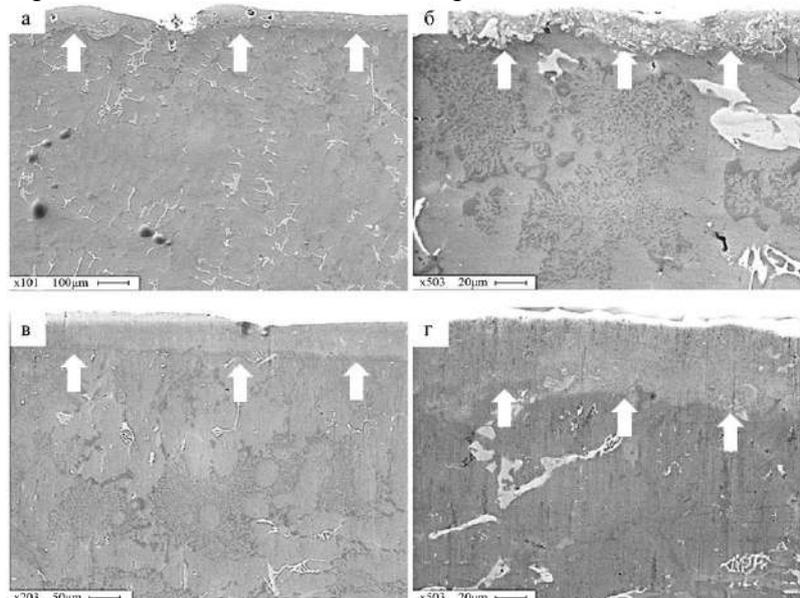


Рис. 1. Электронно-микроскопическое изображение структуры поперечного шлифа силумина марки АК10М2Н, подвергнутого комплексной обработке по режиму №1 (а), режиму №2 (б), режиму №3 (в) режиму №4 (г). Белые стрелки указывают на покрытие, в котором исследовался фазовый состав.

Результаты рентгенофазового анализа, показывают, что комплексная обработка приводит к формированию модифицированного слоя (рис.1), основной фазой которого является твердый раствор на основе алюминия, в гораздо меньшем количестве присутствуют фазы SiO_2 , YAl_3 и Y_2O_3 .

В исходном (литом) состоянии микротвердость твердого раствора на основе составляла 90,2 HV, а твердость эвтектики 104,3 HV. Модифицирование поверхности комплексным методом приводит к кратному увеличению микротвердости материала на величину, зависящую от параметров воздействия. Результаты измерения микротвердости показывают, что микротвёрдость поверхностных слоев доэвтектического силумина АК10М2Н увеличивается в 5 – 6 раз, максимум достигается при режиме обработки №4 и составляет 513,36 HV.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания № 3.1283.2017/4.6.

1. Froend M., Ventzke V., Riekehr S., Kashaev N., Klusemann B., Enz J. Microstructure and hardness evolution of laser metal deposited AA5087 wall-structures // *Procedia CIRP*. 2018. V. 74. P. 131–135.
2. Yu P., Yan M., Tomus D., Brice C.A., Bettles C.J., Muddle B., Qian M. Microstructural development of electron beam processed Al-3Ti-1Sc alloy under different electron beam scanning speeds // *Materials Characterization*. 2018. V. 143. P. 43-49.
3. Romanov D.A., Gromov V.E., Glezer A.M., Panin S.V., Semin A.P. Structure of electro-explosion resistant coatings consisting of immiscible components // *Materials Letters*. 2017. V. 188. P. 25–28.
4. Raheleh A., Reza S., Razavi R., Hossein J. Improving the hot corrosion resistance of plasma sprayed ceria–yttria stabilized zirconia thermal barrier coatings by laser surface treatment // *Materials & Design*. 2014. V. 57. P. 336–341.
5. Utu I.D., Marginean G. Effect of electron beam remelting on the characteristics of HVOF sprayed Al_2O_3 - TiO_2 coatings deposited on titanium substrate // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2017. V. 526. P. 70–75.

DOI: 10.17223/9785946218412/172

ЭФФЕКТЫ ПАМЯТИ ФОРМЫ И СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТИ В ВЫСОКОПРОЧНЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ FeNiCOALTi, УПРОЧНЕННЫХ НАНОЧАСТИЦАМИ

¹Чумляков Ю.И., ¹Киреева И.В., ¹Куксгаузен И.В., ¹Поклонов В.В., ¹Победенная З.В.,
¹Бессонова И.Г., ¹Куксгаузен Д.А., ²Niendorf T., ²Krooß P.

¹Томский государственный университет, Сибирский физико-технический институт, Россия

²Institute für Werkstofftechnik, Universität Kassel, Kassel, Germany

Представлены новые экспериментальные результаты исследования влияния размера и объемной доли наноразмерных частиц γ' -фазы, ориентации кристаллов и способа деформации – растяжении/сжатия на развитие термоупругих γ (ГЦК) – α' (ОЦТ) мартенситных превращений (МП) в свободном состоянии и под нагрузкой, эффект памяти формы (ЭПФ), сверхэластичность (СЭ), температурную зависимость напряжений начала МП под нагрузкой и напряжения пластической деформации высокотемпературной фазы в монокристаллах Fe-28Ni-17Co-11.5Al-2.5Ti (ат., %).

При исследовании температурной зависимости электрического сопротивления $\rho(T)$ показано, что старение при 873 К от 0.5 до 32 часов приводит к увеличению температур начала M_s и конца M_f прямого МП и начала A_s и конца A_f обратного МП. Установлены три режима старения, классификация которых проводится по следующим признакам: соотношение температур M_s и A_s и необратимость изменения $\rho(T)$ в цикле «охлаждение-нагрев». Первый тип переходов это ранние стадии старения $t \leq 0.5$ –3 часа при 873 К, которые характеризуются замкнутой петлей $\rho(T)$ и $M_s < A_s$. В соответствии с термодинамическим анализом обратимых МП это означает, что накопленная при превращении упругая свободная энергия Гиббса ΔG_{el} оказывается меньше удвоенного значения рассеянной энергии Гиббса при МП $2\Delta G_{diss}$. В этом классе переходов частицы γ' -фазы, определенные методом электронной микроскопии, имеют размер от 2 до 4 нм. Второй тип переходов, t от 3 до 30 часов, когда $M_s > A_s$ и $\Delta G_{el} \geq 2\Delta G_{diss}$, имеет место при размерах частиц от 4 до 10 нм и кривые $\rho(T)$ при охлаждении/нагреве оказываются замкнутыми и, следовательно, имеет место обратимые γ - α' МП. Третий тип переходов обнаружен при больших временах старения $t > 30$ часов и характеризуется незамкнутой петлей $\rho(T)$, превращение становится необратимым, размер частиц при этом размер частиц γ' -фазы $d > 10$ –15 нм.

Проведено исследование температурной зависимости напряжений начала МП во всех трех типах γ - α' МП. Показано, что при всех размерах частиц наблюдаются две стадии зависимости $\sigma_{0.1}(T)$, характеризующиеся различным знаком и величиной $d\sigma_{0.1}/dT$. В области низких температур установлено близкое к линейному возрастание $\sigma_{0.1}(T)$, которое связано с развитием γ - α' МП под нагрузкой и описывается соотношением Клапейрона-Клаузиуса:

$$\frac{d\sigma_{0.1}}{dT} = -\frac{\Delta S}{\varepsilon_0} = -\frac{\Delta H}{T_0 \varepsilon_0}, \quad (1)$$

здесь ΔS , ΔH – изменение энтропии и энтальпии при γ - α' превращении, соответственно, ε_0 – деформация превращения, T_0 – температура химического равновесия фаз. Величина $\alpha = d\sigma_{0.1}(T)/dT$ слабо зависит от старения и изменяется от 2.8 до 3.5 МПа/К. Вторая стадия характеризуется уменьшением $\sigma_{0.1}$ с ростом температуры и связана с температурной зависимостью прочностных свойств высокотемпературной фазы. При $T = M_d$, когда имеет место изменение знака зависимости $\sigma_{0.1}(T)$, напряжения для начала МП под нагрузкой $\sigma_{0.1}^{\gamma-\alpha'}$ становятся равными напряжениям пластической деформации высокотемпературной фазы $\sigma_{0.1}^{\gamma}$: $\sigma_{0.1}^{\gamma-\alpha'}(M_d) = \sigma_{0.1}^{\gamma}(M_d)$. Показано, что температура M_d и напряжения в температуре M_d $\sigma_{0.1}(M_d)$ зависят от размера частиц и изменяются от 1000 МПа до 500 МПа при вариации размеров от 2–4 нм до 15–20 нм, соответственно.

Показано, что в [001]- кристаллах при растяжении величина ЭПФ, которая измерялась в дилатометре при охлаждении/нагреве при различном уровне приложенных напряжений от 5 до 550 МПа и СЭ, которая исследовалась в изотермических условиях от $T = 77$ К до $T = M_d$,

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

определяется типом МП и, следовательно, размером частиц. В первом типе МП установлены аномально большие значения СЭ ε_{SE} от 8.7 до 12 %, большие значения механического гистерезиса $\Delta\sigma=300-600$ МПа и ЭПФ ε_{SME} до 8.7 %. Теоретические значения деформации превращения ε_0 при $\gamma-\alpha'$ МП составляют 8.7 % и, следовательно, $\varepsilon_{CЭ} > \varepsilon_0$, $\varepsilon_{ЭПФ} = \varepsilon_0$. СЭ наблюдается при $T > A_f$ и интервал СЭ составляет 50–70 К. Во втором классе превращений впервые установлено, что обратимая деформация равная 3 % наблюдается при $T < A_f$, когда возникающий под нагрузкой мартенсит не является термодинамически устойчивым. Обратимая деформация при $T < A_f$ связана с высоким уровнем накопленной упругой энергии ΔG_{el} , которая значительно превышает рассеянную энергию ΔG_{diss} , обратимое движение кристаллов мартенсита при разгрузке происходит за счет как химической части свободной энергии Гиббса ΔG_{ch} , так и ΔG_{el} . СЭ также обнаружена при $T > A_f$ в широком температурном интервале 50–100 К, величина механического гистерезиса равна $\Delta\sigma=150-300$ МПа, величина ε_{SE} изменяется от 3.5 до 5 %, максимальные значения ЭПФ варьируются от 4.5 до 6.5 %. В третьей группе ЭПФ и СЭ не обнаружены, что связано, во-первых, с потерей когерентного сопряжения решеток с высокотемпературной фазой и мартенситом и, во-вторых, с уменьшением ΔG_{el} и ростом ΔG_{diss} .

Впервые найдено, что старение под растягивающей нагрузкой 150 МПа кристаллов второго типа приводит к появлению двойного ЭПФ, величина которого ε_{TWSME} составляет до 3.5 %. Показано, что изменение температуры через интервал МП в свободном состоянии (циклировании) до 100 циклов не приводит к значительному уменьшению величины ε_{TWSME} , который остается равным 3-3.2 %.

При деформации сжатием [001]-кристаллов СЭ не наблюдается во всех типах превращений, что связано с большими значениями ΔG_{diss} . Предполагается, что при сжатии в отличие от растяжения при деформации происходит раздвойникование кристаллов мартенсита и в результате двойники при своем движении взаимодействуют с частицами γ' -фазы и происходит поворот плоскости габитуса относительно своего положения в мартенсите охлаждения. ЭПФ при сжатии [001]- кристаллов составляет от 2.5 до 3.5 %, что значительно меньше, чем при деформации растяжением при сохранении остальных параметров – размера частиц, температуры испытаний и нагрева – единичными.

Ориентационная зависимость напряжений начала МП под нагрузкой $\sigma_{0.1}^{\gamma-\alpha'}$ в интервале от 77 до 573 К, величины СЭ и ее температурного интервала, величины ЭПФ и ее зависимости от уровня приложенных напряжений от 5 до 550 МПа исследована при деформации растяжением кристаллов ориентированных вдоль $[\bar{1}23]$ - и [001]- направлений. Показано, что величина $\alpha = \sigma_{0.1}^{\gamma-\alpha'}/dT$ в $[\bar{1}23]$ кристаллах значительно выше, чем в [001], что связано согласно с соотношением (1), с меньшими значениями $\varepsilon_{SME}[\bar{1}23] < \varepsilon_{SME}[100]$. Механический гистерезис в $[\bar{1}23]$ кристаллах превышает $\Delta\sigma[001]$, а температурный интервал СЭ, напротив, в $[\bar{1}23]$ ориентации оказывается ниже. Это связано, во-первых, с ориентационной зависимостью напряжений в высокотемпературной фазе: $\sigma_{0.1}^{[123]}(M_d) < \sigma_{0.1}^{[001]}(M_d)$, а температура M_d в $[\bar{1}23]$ кристаллах меньше, чем в [001]. Во-вторых, высокие значения $\Delta\sigma$ в $[\bar{1}23]$ -кристаллах связаны с влиянием внешних напряжений на процессы раздвойникования, которые отсутствуют в [001]- кристаллах при деформации растяжением. Как отмечалось выше для [001] кристаллов при сжатии, в $[\bar{1}23]$ кристаллах при растяжении при раздвойниковании рост ΔG_{diss} связан с необходимостью взаимодействовать двойникам с частицами γ' -фазы и с отклонением плоскости габитуса от своего положения в термическом мартенсите, что приводит к образованию дислокаций при $\gamma-\alpha'$ МП.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-49-04101).

DOI: 10.17223/9785946218412/173

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ МОНОЛИТНЫХ ПЛАСТИН НА ОСНОВЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА С ЦЕЛЬЮ СОЗДАНИЯ ПОРИСТО-МОНОЛИТНЫХ КОНСТРУКЦИЙ

Артюхова Н.В., Кафтаранова М.И., Аникеев С.Г.

Национальный Исследовательский Томский государственный университет, Томск

Прогресс во многих областях современной медицины связан с появлением сложных технических устройств, разработкой новых технологий и материалов, однако на сегодняшний день остается актуальной и практически важной проблема создания медицинских конструкций с улучшенными медико-биологическими свойствами. Важна также конструкция имплантата, которая обеспечивала бы допустимые напряжения в тканях. Поэтому материалы, предназначенные для их изготовления, должны обладать высокими механическими свойствами, обеспечивающими их толерантность к живым тканям [1]. Использование имплантатов из никелида титана основано на их биологической инертности. Физико-механические свойства данного сплава позволяют моделировать сложные по конфигурации конструкции, соответствующие анатомическим особенностям человека [2].

Новый класс разработанных пористо-монолитных конструкций на основе TiNi позволит за счет монолитной и пористых частей повысить как физико-механические свойства, так и обеспечить интеграционную способность имплантата в живую ткань. Это приведет к получению биосовместимых имплантационных комбинированных устройств медицинского назначения для челюстно-лицевой хирургии, онкологии, стоматологии. Примером таких устройств являются протез височно-нижнечелюстного сустава, ребер грудной клетки и дентальные имплантаты, где существуют повышенные требования к эластичности и прочности конструкции имплантата, который имеет комбинированную пористо-монолитную структуру.

Создание пористо-монолитных материалов возможно при условии качественного припекания пористой части к монолитной. В данной работе на этапе создания пористо-монолитных конструкций была решена дополнительная задача по исследованию структурных особенностей монолитных сплавов TiNi исходной композиции. Химический состав и структура данных монолитных материалов имеет важное практическое значение, так как в процессе получения пористо-монолитных материалов происходит сегрегация титана и изменение характеристических температур мартенситных превращений.

В исследовании использованы два сплава никелида титана, отличающиеся содержанием Ti в матричной фазе B2. Сплавы на основе TiNi выплавлены в индукционной печи ИСВ–0,004–ПИ М1 в инертной атмосфере аргона путем переплава титана и никеля. Дозирование компонент проводилось на лабораторных весах I класса точности. Состав полученных сплавов TiNi–I и TiNi–II приведен в таблице 1.

Таблица 1. Элементный состав монолитных сплавов на основе никелида титана

Сплав	Ti ат. %	Ni ат. %
Сплав TiNi–I	52	48
Сплав TiNi–II	51	49

Полученные слитки монолитных сплавов были прокатаны в пластины с промежуточными отжигами на воздухе при температуре $T=450-650$ °С. Для исследования структуры и свойств сплавов на электроискровом станке марки А 20786 вырезались образцы размером 50×1×10 мм. Металлографические исследования проводили на оптическом микроскопе Axiovert–40MAT. Микроструктуру и фазовый состав сплавов исследовали на растровом электронном микроскопе PHILIPS SEM 515 с помощью микроанализатора EDAX ECON IV. Параметры шероховатости поверхности полученных пластин найдены с помощью интерференционного микроскопа-профилометра «МНП-1».

Исследование макро- и микроструктуры данных сплавов показало, что главной особенностью материалов является однородность их сформированной структуры, что

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

позволит в дальнейшем использовать их при создании пористо-монокристаллической конструкции. Индивидуальные отличия каждого сплава проявляются в размере, плотности распределения и форме выделенных частиц. Структура всех сплавов представлена матрицей $TiNi(B2)$ с равномерно выделенными при плавлении и перераспределении материала частицами Ti_2Ni , $TiNi_3$. Размер частиц колеблется в пределах от 0,1 до 5,5 мкм.

Установлено, что исходные пластины, полученные путем прокатки, после отжига на воздухе покрыты массивным слоем оксикабонитридов $Ti_4Ni_2O(N,C)$ толщиной около 10 мкм, который будет препятствовать смачиванию расплавом их поверхности при получении пористо-монокристаллических конструкций. Для его удаления использован водный раствор азотной и плавиковой кислот. Коэффициент шероховатости поверхности Ra после химической обработки составляет 1,5–2 мкм. В ходе создания пористо-монокристаллических конструкций была отмечена целесообразность дополнительной операции механической шлифовки поверхности пластин, которая способствует получению более развитой поверхности. После химической обработки, проводили удаление с поверхности пластин остатков травления путем механической шлифовки, что способствует получению более развитой поверхности с коэффициентом шероховатости Ra 2,5–3 мкм.

Подготовленные монокристаллические пластины помещали в центр кварцевой трубки, которую устанавливали вертикально, после чего вокруг насыпали порошок $TiNi$ с пористостью около 65–70 %. В результате спекания разработанной порошковой шихты с активирующей добавкой Co 1,5 ат. % и монокристаллической пластиной с коэффициентом шероховатости Ra 2,5–3 мкм получены пористо-монокристаллические материалы на основе никелида титана при температуре 1260 °C и времени выдержки 15 мин. Пористая часть имеет пористость 55 % и однородную структуру межпоровых перегородок от периферии к центру образца, где располагается монокристаллическая часть. Это указывает на отсутствие значимого температурного градиента, который может отрицательно повлиять на качество межчастичных контактов, формирующихся в процессе спекания, в том числе на поверхности монокристаллической пластины $TiNi$, которая является теплоотводом в спекаемой системе. Особое значение для достижения оптимальных деформационно-прочностных свойств имеет химический состав в соединении $TiNi$ в монокристаллической части. Методом энергодисперсионного микроанализа установлено, что после высокотемпературного отжига состав матричной фазы $TiNi$ обедняется по титану и лежит в интервале 48,5–49,5 ат. % Ti. Как показали экспериментальные серии спеканий пористо-монокристаллических комбинированных материалов на основе $TiNi$ при меньших температурах и времени выдержки, невозможно достичь условий создания качественных межчастичных контактов в пористой части и на поверхности монокристаллической пластины.

Таким образом, установлено, что полученные монокристаллические сплавы пригодны для создания пористо-монокристаллической конструкции. На границе перехода пористой части в монокристаллическую происходит припекание частиц порошка к монокристаллической пластине $TiNi$, в структуре которой не отмечается увеличения концентрации частиц вторичных фаз Ti_2Ni и $Ti_4Ni_2(O,N,C)$ и разупрочнения полученной конструкции.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00745.

1. Гюнтер В.Э. Медицинские материалы с памятью формы. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы. Т.1. 2011. – 534 с.
2. Гюнтер В. Э. Закон запаздывания и гистерезисные свойства функций состояния термодинамических систем с фазовыми переходами : Методическое пособие. – Томск: Изд-во «НПП «МИЦ». 2016. – 42 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/174

**ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ НАГРУЖЕНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И
РАЗРУШЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТНЫХ
МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНЫХ СМОЛ, УПРОЧНЕННЫХ
НАНОДИСПЕРСНЫМИ ЧАСТИЦАМИ**

Смирнов С.В.

Институт машиноведения УрО РАН, Екатеринбург

Органические полимерные композитные материалы (ПКМ) широко используются в различных областях гражданского строительства, автомобильных, космических, оптоэлектронных и полупроводниковых устройствах. Одним из наиболее эффективных методов улучшения тепловых, механических, реологических, электрических и оптических свойств ПКМ является добавление дисперсных частиц наполнителя в вязкую матрицу [1]. Достаточно часто ПКМ применяются в качестве покрытий или основы. В данном случае для используемого материала важно иметь высокие упругие свойства и твердость и низкую восприимчивостью к длительным механическим воздействиям, в том числе локальным. Теоретические исследования на макромасштабных уровнях прочностных и упругих свойств полимерных материалов при внесении упрочняющих добавок обычно проводятся с использованием методов механики сплошных сред, позволяющих описывать как поведение микрообъемов, так и элементов конструкций. Свойства модифицированных полимеров разработчиками этих материалов обычно определяются на образцах, подвергаемых стандартным испытаниям на растяжение, сжатие, кручение и изгиб. Известно, что свойства материалов отличаются от свойств поверхностных слоев и это связывается как с воздействием окружающей среды, так и особым энергетическим состоянием материала на поверхности и вблизи нее [2]. Объемные свойства определяют конструкционную прочность изделия, способность воспринимать интегральные эксплуатационные нагрузки. От уровня механических свойств поверхностных слоев зависит сопротивление повреждающему действию локальных нагрузок (вмятины, царапины, сколы и др.). Поэтому как объемные, так и поверхностные механические свойства являются важными характеристиками, определяющими эксплуатационные возможности ПКМ. В случае использования ПКМ в качестве адгезива для склеивания элементов конструкций или нанесения защитных покрытий, большую роль играет прочность его сцепления с поверхностью материала, которая зависит от условий нагружения и качества подготовки поверхности. Большинство современных теорий прочности полимерных материалов рассматривают их когезионное и адгезионное разрушение как одноактное катастрофическое явление, не учитывают, что возникновение разрушающей трещины является результатом закономерной последовательности процессов микроразрушения, происходящих на более низком масштабном уровне, не учитывают влияние напряженного состояния на предельные характеристики разрушения.

Целью исследований, проводимых ИМАШ УрО РАН в сотрудничестве с ИОС УрО РАН и ИТПМ СО РАН, является создание научных основ междисциплинарного подхода к дизайну и получению новых адгезивных органических полимерных материалов с нанодисперсным упрочнением, при котором оценка эффективности их применения для конкретных типов изделий может быть осуществлена уже на ранних стадиях создания адгезивных материалов. Для этого решаются задачи разработки адекватных моделей адгезионного и когезионного разрушения указанных материалов, методик изучения их механических и предельных свойств в широком диапазоне изменения температурно-скоростных параметров и напряженно-деформированного состояния, выявления влияния на них состава упрочняющих частиц.

Материалом для исследований являлись композиции на основе коммерческих эпоксидных смол холодного и горячего отверждения, упрочненных наночастицами оксидов и карбидов металлов. В качестве методов исследования использовали инструментальное индентирование, скретч-тесты, испытания образцов специальной формы («бразильский орех», колокольчик, мембрана, сэндвич и др.). Испытания проводили при нормальных условиях и в

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

термокамерах при температуре от -70 до $+140^{\circ}\text{C}$ в условиях статического и циклического нагружения.

В результате проведенных исследований получены следующие новые научные результаты:

1. Сформулированы новые феноменологические модели разрушения при механическом воздействии на защитные и герметизирующие покрытия на основе эпоксидных смол, позволяющие прогнозировать их запас прочности, адгезионное и когезионное разрушение в условиях сложного напряженно-деформированного состояния и температурного воздействия.

2. Разработан подход к получению адгезивных материалов на основе традиционного состава эпоксидного двухкомпонентного клея и на основе эпоксидного однокомпонентного клея, модифицированных упрочняющими нано- и микрочастицами оксидов кремния, титана, цинка и алюминия. Разработана и апробирована методика получения покрытий с повышенными прочностными и адгезионными свойствами в условиях отрицательных температур с использованием предложенных составов адгезивных материалов. Изготовлены лабораторные партии для проведения комплекса исследований.

3. Разработаны и обоснованы результатами конечно-элементного моделирования новые методики определения влияния напряженного состояния на предельную удельную энергию разрушения:

- при испытаниях на локальную адгезионную прочность тонких и толстых покрытий путем нанесения одного или двух отпечатков индентором Виккерса или Роквелла для идентификации CZM модели адгезионного разрушения;

- при испытаниях на когезионную прочность и сдвиговую адгезионную прочность покрытий путем осуществления трехточечного изгиба многослойного образца, состоящего из пластин, склеенных исследуемым адгезивом.

4. В экспериментах по инструментальному индентированию образцов покрытий из разработанных адгезивных материалов на основе эпоксидных смол (ЭД-20, ЭТП-2), модифицированных упрочняющими частицами оксидов кремния, титана, цинка и алюминия определены механические свойства (нормальный модуль упругости, твердость, коэффициенты пластичности и ползучести). Установлены предельные концентрации наполнителей, которые соответствуют оптимальным по соотношению прочностных и пластических свойств исследованных адгезивов.

5. В экспериментах по инструментальному индентированию определено влияние содержания диоксида кремния на изменение механических свойств и кратковременную ползучесть эпоксидной смолы Праймер-204. Установлено, что в интервале времени выдержки при нагрузке до 100 с значения твердости понижаются, а затем стабилизируются в пределах 5% -го разброса данных. Показано, что исследованный материал наилучшим образом соответствует вязко-упругой модели Алфрея, которая описывает ползучесть под действием двух реологических процессов с разными характеристическими временами.

6. Разработана методика определения зависимости предельной энергии когезионного разрушения от показателя жесткости напряженного состояния в испытаниях на трехточечный изгиб многослойных образцов с прослойками из исследуемого адгезива. Обработка результатов проведенных экспериментов позволила получить диаграммы предельной энергии когезионного разрушения для ряда композиций на основе эпоксидной смолы ЭД-20 и клея ЭТП-2 с разной степенью полимеризации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 19-19-00571).

1. Manias E. Nanocomposites: stiffer by design // Nat Mater. 2007. Vol.6. P. 9–11.

2. Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах / отв. ред. В. Е. Панин; Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т физики прочности и материаловедения. – Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2006. 520 с. - (Интеграционные проекты СО РАН; вып. 8).

3. Исследование методом микроиндентирования образцов эпоксидной смолы, упрочненной наночастицами диоксида кремния / С. В. Смирнов, Е. О. Смирнова, И. А. Веретенникова и др. // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. 2017. №.1. С. 24-35

DOI: 10.17223/9785946218412/175

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФОРМАЦИИ ПРОКАТКОЙ С ПОСЛЕДУЮЩИМИ ОТЖИГАМИ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА VT22

¹Мишин И. П., ¹Найденкин Е. В., ¹Раточка И. В., ¹Лыкова О. Н., ²Манишева А.И.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН*

²*Томский государственный университет, Томск*

Для оптимизации ответственных деталей и узлов авиакосмической и автомобильной техники с целью повышения их эксплуатационных свойств, а также снижения габаритно-массовых характеристик весьма перспективными являются титановые сплавы псевдо β и переходного класса. Повышение эксплуатационных характеристик легких сплавов, а также поиск путей их использования при создании новой техники, в том числе для авиационной и автомобильной промышленности, представляет большой научный и практический. Решение этой задачи путем формирования ультрамелкозернистой структуры в титановых сплавах псевдо β и переходного класса позволит выработать общие подходы к комплексному повышению технических характеристик широко используемых конструкционных материалов.

В настоящей работе проведено исследование структурно-фазового состояния и механических свойств титанового сплава VT22 переходного класса с ультрамелкозернистой (нано-) структурой, сформированной методом радиально сдвиговой (поперечно-винтовой) и ручьевого прокатки.

В исходном состоянии сплав VT22 представляет собой смесь α - и β -фаз со средним размером зерен 150 мкм, внутри которых наблюдается пластинчатая структура α - фазы. Сплав в состоянии поставки имеет предел прочности 1250–1300 МПа, предел текучести 1200 МПа и пластичность (деформация до разрушения) $\delta=7\%$.

Поперечно-винтовая прокатка сплава VT22 в интервале температур 850-750 °С приводит к формированию развитой субзеренной структуры (размер элементов зеренно-субзеренной структуры 0,4-0,7 мкм) с низкой плотностью решеточных дислокаций.

Последующая прокатка в ручьевых вальцах приводит к дальнейшему изменению структурно-фазового состояния сплава. Наряду с уменьшением размера элементов зеренно-субзеренной структуры β -фазы происходит перераспределение и уменьшение толщины пластин α - фазы. Прочностные свойства повышаются, достигая значений свойств сплава в состоянии поставки (табл. 1). Однако при этом, пластичность сплава возрастает до $\delta=12\%$.

Старение в интервале температур 420-550 °С в течение 3-5 ч не изменяет размер зеренно-субзеренной структуры, однако приводит к формированию в зернах β -фазы мартенситной тонкоигольчатой (толщиной несколько нанометров) структуры. Формирование такой иерархически организованной структуры приводит к существенному повышению механических свойств сплава по сравнению с состоянием поставки и после прокатки (табл. 1).

Таблица 1. Механические свойства сплава VT22 после прокатки и последующего старения.

Режим старения	Поперечно-винтовая прокатка			Дополнительная прокатка в ручьевых вальцах		
	σ_B	$\sigma_{0.2}$	δ	σ_B	$\sigma_{0.2}$	δ
	1000	920	8	1240	1200	12
420 °С 5ч	1700	1650	0,8	1600	1480	6,4
450 °С 5ч	1700	1600	2	1550	1500	6,9
520 °С 5ч	1570	1510	5,2	1470	1450	9
550 °С 3ч	1500	1450	6,5	1440	1400	7

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-19-00033).

DOI: 10.17223/9785946218412/176

ВЛИЯНИЕ ИМПЛАНТАЦИИ АЛЮМИНИЯ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ И УПРОЧНЕНИЕ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО ТИТАНА

¹Никоненко А.В., ²Попова Н.А., ^{2,3}Никоненко Е.Л., ^{3,4}Калашников М.П., ¹Окс Е.М.,
⁵Курзина И.А.

¹Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск

²Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск

³НИИ Томский государственный политехнический университет, Томск

⁴Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

⁵НИИ Томский государственный университет, Томск;

Ионная имплантация ультрамелкозернистого (УМЗ) α -титана (средний размер зерна – 0.2 мкм) проведена на ионном источнике MEVVA-V.RU при температуре 623К, ускоряющем напряжении 50 кВ, плотности тока ионного пучка 6.5 мА/см², расстоянии 60 см от ионно-оптической системы. Доза облучения составляла $1 \cdot 10^{18}$ ион/см², времени облучения – 5.25 ч. Изучение микроструктуры и фазового состава проведено на просвечивающем электронном микроскопе ЭМ-125 при ускоряющем напряжении 120 кВ. Изучение микроструктуры и фазового состава имплантированного титана проводили в области модифицированного слоя на глубине 50-70 нм от облученной поверхности.

Исследовано структурно-фазовое состояние поверхностных слоев α -Ti в УМЗ состоянии. Установлено, что в результате облучения УМЗ-титана ионами алюминия образуется полифазный имплантированный слой на основе зерен α -титана, содержащий алюминидные, оксидные и карбидные фазы. А именно: 1) зерна β -Ti, имеющие ОЦК кристаллическую решетку (пространственная группа Im3m), обладающие пластинчатой формой и располагающиеся по границам зерен α -Ti; 2) фаза Ti₃Al – упорядоченная фаза со сверхструктурой D019 и пространственной группой P63/mmc, обладающая ГПУ кристаллической, формирующаяся в виде пластинчатых выделений по границам зерен α -Ti; 3) фаза TiAl₃ – упорядоченная фаза со сверхструктурой D022, обладающая ОЦТ кристаллической решеткой с пространственной группой I4/mmm и локализуемая в виде округлых частиц в тройных стыках и по границам зерен α -Ti; 4) частицы карбида титана (TiC) имеющие ГЦК кристаллическую решетку (пространственная группа Fm3m), располагающиеся внутри зерен α -Ti и обладающие округлой формой; 5) включения оксида титана TiO₂ (иначе – брукит), обладающие орторомбической кристаллической решеткой (пространственная группа Pbcn), располагающиеся на границах и внутри зерен α -Ti на дислокациях и обладающие округлой формой.

В условиях ионной имплантации наблюдается реструктуризация титановой матрицы – имплантация приводит к уменьшению продольного размера зерна α -Ti (с 1.9 мкм до 0.7 мкм), при этом коэффициент анизотропии зерен уменьшается в 3 раза.

Проведен расчет прочностных составляющих, входящих в предел текучести. Показано, что имплантация приводит не только к существенному изменению структурно-фазового состояния материала, но и к дополнительному упрочнению практически в 2.5 раза. Оценена доля вклада отдельных механизмов упрочнения в общее упрочнение сплава: $\Delta\sigma_n$ – напряжение трения дислокаций в кристаллической решетке α -Ti; $\Delta\sigma_{тв}$ – упрочнение твердого раствора на основе α -Ti атомами легирующих элементов (Al, C, O); $\Delta\sigma_l$ – упрочнение дислокациями «леса»; $\Delta\sigma_d$ – упрочнение дальнедействующими полями напряжений; $\Delta\sigma_{ор}$ – упрочнение материала некогерентными частицами при обходе их дислокациями по механизму Орована; $\Delta\sigma_3$ – упрочнение за счет границ зерен. Показано, что доля вклада неодинакова. И вклад каждого из этих механизмов разный. Тем не менее, основной вклад в общее упрочнение после имплантации вносит $\Delta\sigma_{ор}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ № 19-08-01041

DOI: 10.17223/9785946218412/177

КОМПОЗИТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ ($\text{Cu}_x\text{Me}_{1-x}$)O, ГДЕ Me – Zn, Ag: СИНТЕЗ, СВОЙСТВА, АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ И ЦИТОТОКСИЧНОСТЬ

¹Кондранова А.М., ¹Ложкомоев А.С., ¹Казанцев С.О., ¹Первиков А.В., ¹Фоменко А.Н.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Биметаллические наночастицы содержащие два металла на уровне одной частицы, представляют большой интерес в поисках новых антимикробных агентов для борьбы с резистентными штаммами в качестве альтернативы антибиотикам. Наибольшей доказанной антимикробной активностью обладают наночастицы серебра, оксида меди и цинка [1]. Ожидается, что применение композитные наночастиц ($\text{Cu}_x\text{Me}_{1-x}$)O, где Me – Zn, Ag позволит получить новые высокоэффективные антимикробные материалы [2]. Одним из перспективных методов получения этих наночастиц оксидов металлов является электрический взрыв двух проволок в атмосфере кислорода [3]. Варьируя диаметр и материал проводника, можно получать нанопорошки различного состава. В настоящей работе были получены наночастицы ($\text{Cu}_x\text{Me}_{1-x}$)O, исследованы их физико-химические характеристики, антимикробная активность и цитотоксичность. Установлено, что синтезированные наночастицы ($\text{Cu}_x\text{Me}_{1-x}$)O имеют близкие по размеры (80-110 нм) и положительный дзета-потенциал около 20 мВ, независимо от состава. Частицы имеют преимущественно сферическую или близко к сферической форме. По данным элементного анализа в наночастицах ($\text{Cu}_x\text{Zn}_{1-x}$)O медь и цинк равномерно распределены по объему наночастицы. Наночастицы CuO-Ag представлены фазами оксида меди и металлическим серебром, компоненты также равномерно распределены. При исследовании антимикробной активности синтезированных образцов в отношении бактерий *Escherichia coli* ATCC 25922, клинического штамма метициллин-резистентного *Staphylococcus aureus* MRSA ATCC 43300 было установлено, что биметаллические наночастицы более эффективно подавляют рост данных штаммов бактерий (данные МИК представлены в таблице 1), по сравнению с наночастицами отдельных металлов, полученных при диспергировании одиночных проводников в кислородсодержащей атмосфере. Цитотоксичность клеток определяли на клеточной линии ДК-4 (штамм диплоидных клеток, кожно-мышечная ткань эмбриона человека) при помощи МТТ-теста спектрофотометрическим методом. Было показано, что синтезированные наночастицы отдельных металлов и композитные наночастицы подавляют рост клеток только в высоких концентрациях (0.5 мг/мл и более). Полученные наночастицы являются перспективными кандидатами для биомедицинских приложений.

Таблица 1. Минимально ингибирующая концентрация наночастиц.

Наночастицы	МИК, мг/мл	
	MRSA	E.coli
($\text{Zn}_{0,55}\text{Cu}_{0,45}$)O	0,25	0,75
($\text{Zn}_{0,55}\text{Ag}_{0,45}$)O	0,25	0,25
Ag(O)	1,0	2,0
CuO	0,75	1,5
ZnO	1,0	1,75

Композитные наночастицы были получены и исследованы при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 17-79-20382). Цитотоксичность исследована в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. S.M. Dizaj, F. Lotfipour, M. Barzegar-Jalali, M.H. Zarrintan, K. Adibkia, Antimicrobial activity of the metals and metal oxide nanoparticles, Mater. Sci. Eng. C. 44 (2014) 278-284.
2. M. Khatami, R.S. Varma, N. Zafarnia, H. Yaghoobi, M. Sarani, V.G. Kumar, Applications of green synthesized Ag, ZnO and Ag/ZnO nanoparticles for making clinical antimicrobial wound-healing bandages, Sust. Chem. Pharm. 10 (2018) 9-15.
3. M. I. Lerner, A. V. Pervikov, E. A. Glazkova, N. V. Svarovskaya, A. S. Lozhkomoev, S. G. Psakhie, Structures of binary metallic nanoparticles produced by electrical explosion of two wires from immiscible elements, Powder Technol. 288 (2016) 371-378.

DOI: 10.17223/9785946218412/178

ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭПОКСИДНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ

Брусенцева Т.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск

Длительная прочность и долговечность - это важнейшие характеристики, используемые при проектировании и реализуемые при эксплуатации изделий из полимерных композиционных материалов. Путем сочетания наполнителя и полимерной матрицы можно получить материалы с заданными физико-механическими и эксплуатационными свойствами, порой превосходящими аналогичные свойства металлов и сплавов. Введение наночастиц обеспечивает композиту достижение новых, не свойственных ненаполненному полимеру характеристик, не снижая пригодности его к переработке и не приводя к увеличению массы материала, поскольку используются они в очень малых количествах.

Исследования проводились на эпоксидном связующем марки LE - 828, в качестве отвердителя использовался изометилтетрагидрофталевый ангидрида (ИМТГФА) и катализатор ТИС К-01 для эпоксидных смол. В качестве наполнителя применяли нанодисперсный порошок производства Degussa A380 – Аэросил, гидрофильный порошок оксида кремния, $\text{SiO}_2 > 99.8 \%$, $\text{Al}_2\text{O}_3 < 0.05 \%$, $\text{Fe}_2\text{O}_3 < 0.003 \%$, $\text{TiO}_2 < 0.03 \%$, $\text{HCl} < 0.025 \%$. Среднечисленный размер 7 нм, удельная площадь поверхности $380 \text{ м}^2/\text{г}$. Матрица содержала 100 масс.ч. LE - 828, 80 масс.ч. ИМТГФА и 4 масс.ч. ТИС К - 01. Концентрация нанодобавок составляла 0 % - 2 % от массы связующего. Эксперименты на растяжение проводились на испытательной установке Zwick Roell Allround Z005. Для экспериментов образцы изготавливались в соответствии с ГОСТ 11262-80 с прямоугольным сечением в рабочей части. Во время испытания дополнительно задавали преднагрузку 0.3 мПа, скорость перемещения траверсы 5 мм/мин. и размеры образца. Для каждой серии экспериментов изготавливалось не менее 10 образцов, в работе приведены усредненные данные.

Зависимость модуля упругости и деформации при разрушении от массовой концентрации наполнителя представлено на рисунке 1 и 2 соответственно.

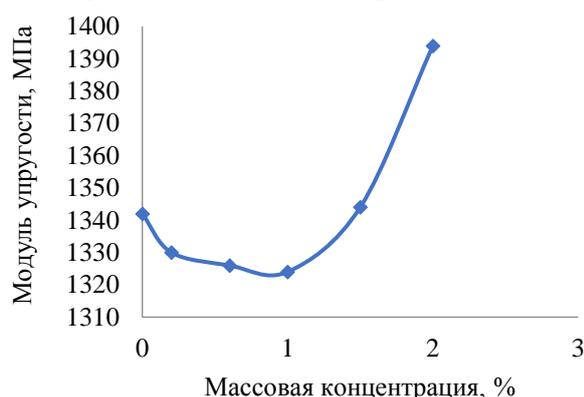


Рис. 1. Зависимость модуля упругости при растяжении эпоксидного композита от массового содержания наночастиц А - 380

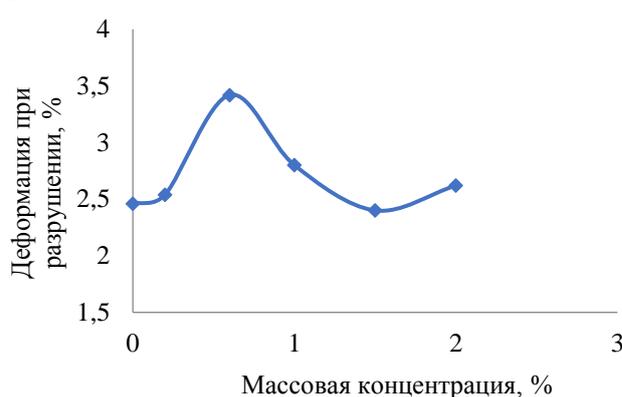


Рис. 2. Зависимость деформации при разрушении эпоксидного композита от массового содержания наночастиц А - 380

Как видно из рисунка 1, введение наночастиц диоксида кремния в эпоксидное связующее до 1 % в незначительной мере ухудшает модуль упругости композита. При этом добавление наполнителя от 1 % до 2 % приводит к увеличению модуля упругости на 4 %. Одним из важнейших показателей для эпоксидного связующего является деформация при разрушении, она увеличилась на 39 % при 0.6 % массовой концентрации наполнителя.

Прочностные свойства эпоксидного нанокompозита в большей степени зависят от массовой концентрации наполнителя. Наибольшие показатели прочности при растяжении и

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

напряжения при разрушении наблюдаются при концентрации наполнителя 0.6 %, они увеличились на 33 % и 34 % соответственно (рисунок 3,4).

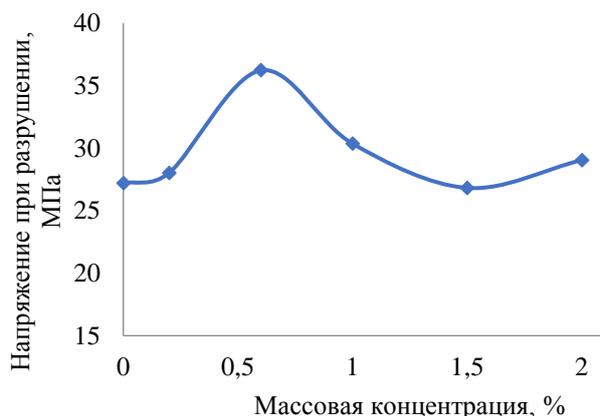


Рис. 3. Зависимость напряжения при разрушении эпоксидного композита от массового содержания наночастиц А - 380

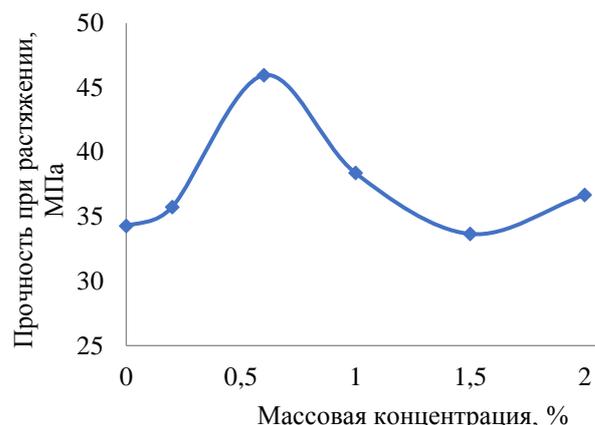


Рис. 4. Зависимости прочности при растяжении эпоксидного композита от массового содержания наночастиц А - 380

Заключение

Оптимизирована технология и физико-механические характеристики эпоксидного связующего марки LE – 828. Проведены серии экспериментов на одноосное растяжение, которые показали, что для наполненных эпоксидных смол модуль упругости увеличивается на 4% при массовой концентрации порошка 2 %. Определены оптимальные степени наполнения эпоксидной матрицы наночастицами диоксида кремния 0.2 % - 1 % по массе. Максимальные прочностные характеристики проявляются при концентрации 0.6 % - напряжение разрушение и прочность при растяжении увеличились на 33.2 % и 34.2 % соответственно; деформация разрушения возросла на 39 %. Результаты экспериментов показали целесообразность использования нанопорошков диоксида кремния для модификации эпоксидной смолы LE - 828 с целью улучшения ее механических характеристик.

DOI: 10.17223/9785946218412/179

ВЛИЯНИЕ ТИТАНА И МОЛИБДЕНА НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ ЖАРОПРОЧНОГО СПЛАВА ПОСЛЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

^{1,2}Никоненко Е.Л., ¹Попова Н.А., ¹Конева Н.А.

¹Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, Россия

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Одним из перспективных направлений в успешном развитии современной техники является создание сплавов, содержащих интерметаллидные фазы. Примером являются суперсплавы на основе смеси γ' - и γ -фаз, в которых γ -фаза представляет собой неупорядоченный ГЦК-твердый раствор на основе, в частности, никеля и алюминия, а γ' -фаза (в нашем случае фаза Ni_3Al) – упорядоченную фазу со сверхструктурой $L1_2$. В реальных суперсплавах на никелевой основе, состав которых является многокомпонентным, наряду с Ni и Al имеются атомы других элементов, таких как Ti, Cr, Co, Mo, W, Ta, Nb, Hf, Re. Легирование позволяет значительно повысить рабочую температуру суперсплавов и сопротивление ползучести.

Целью работы являлось качественные и количественные исследования структуры, фазового состава, морфологии фаз сложнолегированных жаропрочных сплавов, имеющих одинаковую основу, подвергшиеся деформации, но содержащие различное количество таких легирующих элементов, как молибден и титан.

Методами просвечивающей дифракционной электронной микроскопии (ПЭМ) и растровой электронной микроскопии (РЭМ) проведены исследования фазового состава и структуры сплавов на основе Ni-Al-Co. Сплавы были получены методом направленной кристаллизации (НК), а затем подвергнуты деформации сжатием при температуре 1200°C до 70%. Химический состав сплавов различался только содержанием молибдена и титана. Сплав с содержанием молибдена 1 вес.% и титана 2 вес.% обозначен №1, а сплав с содержанием молибдена 2 вес.% и титана 1 вес.% – №2. Содержание остальных элементов было одинаково: Ni – 53.4 вес.%, Co – 30 вес.%, Al – 9.5 вес.%, Cr и Nb по 2 вес.%

Исходное состояние (состояние после НК). Исследования показали, что основой сплавов являются γ' -фаза – многокомпонентная интерметаллидная фаза со сверхструктурой $L1_2$. Фаза γ' всегда хорошо упорядочена. Второй по объему фазой является γ -фаза – ГЦК твердый раствор с ближним порядком в расположении атомов. Основу этого твердого раствора составляют Ni и Co, алюминий присутствует в количестве не более 10 авес. %. Также обнаружена третья фаза – β . Она упорядочена и имеет сверхструктуру $B2$. В исследуемых сплавах образуется в малых количествах четвертая, ε -фаза. Она имеет гексагональную плотноупакованную кристаллическую решетку с упорядоченным расположением атомов – сверхструктура DO_{24} . Количественный фазовый состав исследуемых сплавов представлен в таблице.

Таблица. Фазовый состав исследуемых сплавов

№ образца	Объемная доля фазы, $\delta \pm 0.05$			
	γ'	γ	β	ε
№1 НК	0.78	0.15	0.05	0.02
№2 НК	0.61	0.25	0.09	0.05
№1 НК + деформация при 1200° до 70% сжатие	0.90	0.08	нет	0.02
№2 НК + деформация при 1200° до 70% сжатие	0.96	0.04	нет	нет

Структура сплавов № 1 и № 2, хорошо видна на рис. 1а и 1б, соответственно. Сплавы состоят из крупных частиц γ' -фазы (на рис. указано стрелками) и мелкодисперсной смеси ($\gamma + \gamma'$)-фаз, которая занимает большую часть объема, где размер частиц γ' -фазы на порядок меньше частиц, которые можно увидеть методом РЭМ.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

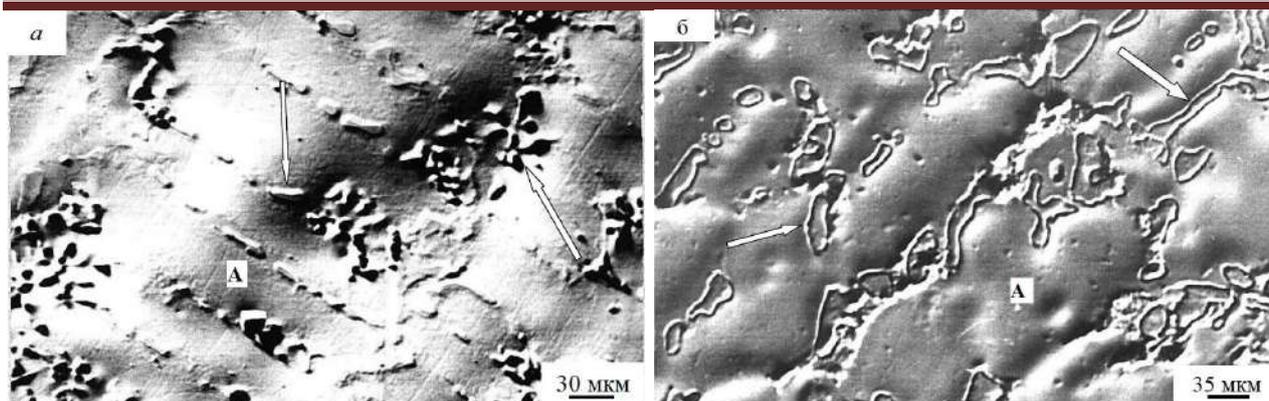


Рисунок 1. Изображения структуры сплава №1(а) и сплава №2(б), полученные методом РЭМ.

Стрелками указаны крупные частицы γ' -фазы, А – области мелкодисперсной смеси ($\gamma + \gamma'$)

Присутствие β -фазы и ε -фазы обнаруживается только при исследовании методом ПЭМ, и обе фазы располагаются внутри крупных частиц γ' -фазы. β -фаза имеет игольчатую форму, а ε -фаза имеет пластинчатый вид.

Влияние деформации на структуру сплавов. Пластическая деформация после НК значительно увеличивает объемную долю γ' -фазы (см. таблицу). Это означает, что по фазовому составу пластическая деформация приближает исследуемые сплавы к равновесию. Другое заметное изменение, вызванное пластической деформацией при температуре 1200°C, – уменьшение объемной доли крупных частиц γ' -фазы. Вместо крупных частиц этой фазы возрастает объемная доля γ' -фазы, находящаяся в смеси ($\gamma'+\gamma$)-фаз. В сплаве № 2 изменения морфологии более радикальные. Двухфазная смесь полностью меняет структуру, на месте частиц γ' -фазы, находящейся в смеси ($\gamma'+\gamma$)-фаз и имеющей форму кубоидов, появляются мелкие зерна. Сплавы после деформации обладают поликристаллической структурой, морфология которой далека от равновесия. Тем не менее, крупные частицы γ' -фазы сохранились, хотя их доля и размеры существенно уменьшились по сравнению с исходным состоянием (НК). Исследования показали, что часть зерен имеет крапчатый контраст, и этот контраст обусловлен наличием мелкодисперсной смеси ($\gamma+\gamma'$)-фаз в сплаве № 1 и мелкозернистой структуры в сплаве № 2. Размер частиц γ' -фазы, находящихся в смеси ($\gamma'+\gamma$)-фаз в сплаве № 1 увеличился в пять раз по сравнению с исходным состоянием сплава № 1 (НК). Сформировавшаяся на месте двухфазной ($\gamma+\gamma'$)-смеси после деформации в сплаве № 2 мелкозернистая структура имеет средний размер 1.5 мкм. Мелкозернистые области хорошо упорядочены. После образования зерен γ' -фазы, γ -фаза сохраняется в небольшом объеме внутри них. Судя по ее морфологии и результатам влияния последующего отжига после деформации, можно утверждать, что полученная картина отвечает кинетике растворения γ -фазы.

Таким образом, исследования показали, что различное содержание молибдена и титана не влияет на фазовый состав, но приводит к его количественному изменению. Также, помимо морфологии γ и γ' -фаз пластическая деформация влечет изменение фазового состава. В сплаве № 2 полностью отсутствуют β - и ε -фазы. В сплаве № 1 также нет β -фазы, но сохранилось небольшое количество ε -фазы (см. таблицу).

DOI: 10.17223/9785946218412/180

**МИКРОВОЛОКНА АЦЕТАТ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ
НАНОСТРУКТУРАМИ $AlOON/Fe_2O_3$: СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И АНТИМИКРОБНАЯ
АКТИВНОСТЬ**

Бакина О.В., Казанцев С.О., Кондранова А. М., Рубцов К.В.

Институт физики прочности и материаловедения

Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН), Томск

Целлюлозные микроволокна в настоящее время находят широкое применение благодаря хорошей гидрофильности, биodeградируемости и биосовместимости и относительно невысокой стоимости. Материалы на целлюлозы привлекают все большее внимание в таких областях биомедицины, как разработка новых перевязочных материалов, средств доставки лекарств и тканевой инженерии. Модифицирование целлюлозных микроволокон наночастицами или наноструктурами, придающими полученным материалам новые функциональные свойства, безусловно, является актуальным. Наноструктуры на основе оксидов алюминия и железа характеризуются развитой поверхностью и наличием большого спектра активных центров для контролируемой доставки лекарств и нацеливания. Кроме того они нетоксичны и неиммуногенны.

В настоящей работе разработан новый метод получения композитных наноструктур $AlOON/Fe_2O_3$ и модификация ими микроволокон из ацетата целлюлозы. Метод основан на окислении водой нанопорошка Al/AlN в мягких условиях в присутствии волокон ацетата целлюлозы марки ФПА-15-2.0 (Esfil Tehno, Эстония), с последующей пропиткой их суспензией наночастиц Fe_2O_3 , предварительно полученных методом химического осаждения из раствора ацетата железа. Полученные наноструктуры и модифицированные волокна были охарактеризованы методами просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии, ИК-спектроскопии, рентгенофазового анализа, тепловой десорбции азота и микроэлектрофореза. Антимикробная активность полученных образцов была оценена против бактерий *E. coli*, *P. aeruginosa*, *S. aureus* и MRSA методом радиальной диффузии в агар (ГОСТ Р ИСО 20776). Согласно данным ПЭМ синтезированные наноструктуры представляют собой агломераты складчатых нанолитовых структур оксида алюминия с включениями стержней оксида железа.

Удельная поверхность наноструктур составила $327 \text{ м}^2/\text{г}$, модифицированных волокон – $117 \text{ м}^2/\text{г}$, ξ -потенциал составил 37 мВ и 12 мВ соответственно. Непосредственно после модификации волокна ФПА окрашиваются из белого цвета в коричневый. После модификации химический состав поверхности волокна не изменяется, наноструктуры $AlOON-Fe_2O_3$ равномерно распределяются по поверхности. Содержание наноструктур составило 7 мас. %. При инкубации диска из модифицированных волокон было обнаружено, что вокруг материала формируется небольшая зона лизиса бактериальной культуры. При этом в области под диском бактерий не обнаружено.

Разработанный способ модификации является простым, энергоэффективным и, вероятно, имеет широкое применение для микроволокон другого химического состава, а также обладает потенциалом для получения новых материалов на основе целлюлозы с функционализированной поверхностью.

DOI: 10.17223/9785946218412/181

**ИЗМЕНЕНИЕ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ И ТВЁРДОСТИ
ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ СПЛАВА TiNi В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЧИСЛА
ИМПУЛЬСОВ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ**

¹Дьяченко Ф.А., ²Атовуллаева А.А., ³Яковлев Е.В., ^{1,2}Мейснер Л.Л.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

³Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

Неоднородность поверхности металлических материалов, связанная с наличием частиц вторых и примесных фаз, может приводить к ухудшению физико-механических свойств. Это важно учитывать, если речь идёт об использовании сплава на основе никелида титана (TiNi сплав), обладающего функциональными свойствами на основе эффектов памяти формы и сверхэластичности (ЭПФ-СЭ). На сегодняшний день изделия из данного сплава активно применяются в сфере микроэлектромеханических систем – МЭМС-технологий [1].

Одним из способов очищения поверхности от частиц вторых и примесных фаз является облучение импульсным низкоэнергетическим (10–30 кэВ) сильноточным (10–25 кА) электронным пучком (НСЭП). Однако данный вид обработки поверхности не всегда положительно влияет на интегральные механические свойства TiNi сплава. Это связано, в частности с тем, что модифицированные микронные поверхностные слои могут являться концентраторами остаточных упругих напряжений, наличие которых может негативно сказываться на функциональные свойства сплава – ЭПФ-СЭ.

Целью данной работы является исследование изменения морфологии поверхности и твёрдости поверхностного слоя сплава TiNi в зависимости от числа импульсов воздействия электронным пучком.

В данной работе использовали образцы размерами 10×10×1 мм, вырезанные методом лазерной резки из горячекатаного листового проката, изготовленного из промышленного сплава на основе TiNi марки ТН1 (ООО «Промышленный центр МАТЕК-СПФ», Россия). Сплав выплавлен методом вакуумной индукционной плавки в печи с графитовым тиглем. Химический состав сплава: Ti-55,08 Ni-0,051 C-0,03 O-0,002 N (вес. %). Исходные поверхности всех образцов перед облучением подготовлены следующим образом: пошаговая механическая шлифовка/полировка до «зеркального блеска» на шлифовально-полировальном станке *Saphir 550 (ATM GMBH, Германия)*; электролитическая полировка в растворе кислот (3 ч. CH₃COOH + 1 ч. HClO₄); промывка в ультразвуковой ванне с дистиллированной водой ($t = 15$ мин). Модификацию поверхности образцов TiNi сплава проводили на автоматизированной электронно-пучковой установке «РИТМ-СП» (ООО «Микросплав, Россия, Томск) [2]. Плотность энергии электронного пучка $E_s = 1,7$ Дж/см²; длительность импульса $\tau = 2–2,5$ мкс; число импульсов воздействия $n = 5$ и $n = 15$.

Исследование морфологии поверхности образцов до и после обработки пучком заряженных частиц проводили на оптическом микроскопе *Axiovert 200MAT (Zeiss, Германия)* (ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ СО РАН, Россия, Томск) с использованием методов оптического светлого поля (ОСП) и дифференциального интерференционного контраста (ДИК). Исследование топографии поверхности проводили на оптическом интерференционном профилометре *New View 6200 (Zygo, Германия)* (ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ СО РАН, Россия, Томск). В качестве основного измеряемого параметра, используемого для установления корреляционных зависимостей, был выбран параметр средней шероховатости поверхности R_a , рассчитанный в соответствии с нормами и рекомендациями ГОСТа 2789-73 [3]. Для измерения динамической микротвёрдости $H_{0,05}$ использовали нанотвердомер *Nano Hardness Tester (CSM NHT, Швейцария)* (ЦКП НИИ ЯФ ТПУ, Россия, Томск). Расчет параметра микротвёрдости $H_{0,05}$ проводился по методике Оливера-Фарра [4].

Методами оптической микроскопии и интерференционной профилометрии установлено, что морфология поверхности образцов TiNi сплава в результате НСЭП-обработок приобретает

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

кратерообразный рельеф. Установлено, что при числе импульсов $n = 5$, коэффициент шероховатости R_a равен $(0,07 \pm 0,01)$ мкм, и близок к величине параметра для исходного образца $R_a = (0,06 \pm 0,01)$ мкм. При значении числа импульсов $n = 15$ параметр шероховатости R_a значительно уменьшается, и равен $(0,03 \pm 0,01)$ мкм. Методом наноиндентирования установлено, что в образцах после НСЭП-обработок наблюдается увеличение параметра микротвердости H_{OP} . При числе импульсов воздействия $n = 5$, значительное упрочнение материала происходит на глубине до ~ 500 нм, а при $n = 15$ – до ~ 1000 нм. На глубине более $\sim 1,5$ мкм параметр микротвердости H_{OP} после НСЭП-обработок принимает значения, соответствующие величине параметра микротвёрдости материала TiNi-подложки до обработок.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие выводы:

1. В результате электронно-пучковой обработки на поверхности TiNi сплава формируется кратерообразный рельеф.
2. При числе импульсов $n = 15$ параметр шероховатости R_a уменьшился в 2 раза, при $n = 5$ параметр шероховатости R_a близок к значениям для исходного образца.
3. Установлено, что в образцах после НСЭП-обработок в зависимости от числа импульсов воздействия электронным пучком n , толщина модифицированного слоя, в котором наблюдается упрочнение, возрастает при увеличении числа импульсов воздействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект РНФ №18-19-00198 от 26.04.2018).

1. Mohd J.J., Leary M., Subic. A., Gibson A.M. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities // Materials and Design. 2014. № 56. P. 1078–1113.
2. Марков А.Б., Миков А.В., Озур Г.Е., Падей А.Г. Установка РИТМ-СП для формирования поверхностных сплавов // ПТЭ. 2011. №6. С. 122–126.
3. ГОСТ 2789–73, Шероховатость поверхности. Параметры и характеристики // М. : Стандартиформ. 2005. 7 с.
4. Pharr G.M., Oliver W.C. Measurement of thin film mechanical properties using nanoindentation // MRS Bulletin. 1992. Vol. 17. P. 28–33.

DOI: 10.17223/9785946218412/182

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА РАЗВИТИЕ ДЕФОРМАЦИИ В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ С ИЕРАРХИЧЕСКОЙ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ СТРУКТУРОЙ В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРТУР 293-973 К

¹Грабовецкая Г.П., ¹Забудченко О.В., ¹Мишин И.П., ²Степанова Е.Н.

¹*Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*
grabg@ispms.tsc.ru

Эффективным способом повышения стабильности структуры и механических свойств материалов, в том числе и сплавов титана, является формирование в них в процессе интенсивной пластической деформации (ИПД) ультрамелкозернистой (УМЗ) иерархически организованной внутренней структуры, которая обеспечивает требуемое сочетание свойств за счет наличия двух и/или нескольких структурных элементов (или фаз) разной дисперсности. Однако уменьшение размера зерен приводит к росту поглощения водорода сплавами титана. Водород в зависимости от концентрации и температуры может оказывать на эти сплавы охрупчивающее или пластифицирующее влияние.

Целью данной работы является исследование влияния присутствия водорода в твердом растворе на деформационное поведение в интервале температур 293-973 К УМЗ титанового сплава системы Ti-Al-V-Mo с иерархически организованной внутренней структурой.

В качестве материала для исследования использовали промышленный ($\alpha+\beta$) титановый сплав марки ВТ16 с содержанием водорода 0,003 мас. % (далее сплав ВТ16) и 0,3 мас.% (далее сплав ВТ16-Н). Ультрамелкозернистая структура в обоих сплавах была сформирована методом прессования со сменой оси деформации. Было проведено два цикла прессования со скоростью $\sim 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ при температурах 1023 и 923 К. Один цикл состоял из трех прессований. Деформация за одно прессование составляла $\sim 50\%$.

Установлено, что в результате прессования в сплавах ВТ16 и ВТ16-Н формируется однородная ($\alpha+\beta$) зеренно-субзеренная УМЗ структура со средним размером элементов 0,45 и 0,44 мкм соответственно. При этом в обоих сплавах примерно в 1/3 элементов наблюдается пластинчатая структура с поперечным размером пластин 10-30 нм. Содержание β -фазы после прессования в сплаве ВТ16 увеличилось с 22 до 34 об.%, а в сплаве ВТ16-Н – до 54 об.%.

Присутствие водорода в твердом растворе в УМЗ сплаве ВТ16-Н в количестве ~ 0.3 мас. % в процессе растяжения в интервале температур (293-573 К) подавляет развитие локализации пластической деформации на макроуровне, что приводит к повышению его однородной деформации и общей деформации до разрушения по сравнению с УМЗ сплавом ВТ16. В интервале более высоких температур (773-973 К) присутствие водорода снижает устойчивость УМЗ сплава ВТ16-Н к локализации пластической деформации на макроуровне и величину деформации до разрушения. При этом наблюдается повышение температуры перехода УМЗ сплава ВТ16-Н в сверхпластическое состояние и уменьшение температурного интервала проявления его сверхпластических свойств по сравнению с УМЗ сплавом ВТ16.

В процессе растяжения при температурах выше 773 К в УМЗ сплавах ВТ16 и ВТ16-Н имеет место фазовое превращение $\beta \rightarrow \alpha$ и диффузионное перераспределение легирующих элементов. Объемная доля β -фазы в образцах обоих сплавов после растяжения при температурах 873 и 973 К колеблется в пределах 25-23 об.%, а параметр ее решетки уменьшается до 0,3248-0,3245 нм.

Показано, что такие процессы, как фазовое превращение $\beta \rightarrow \alpha$, диффузионное перераспределение легирующих элементов, а также дегазация водорода из сплава при растяжении активизируют развитие основного механизма сверхпластической деформации – зернограничного скольжения, в то время как присутствие водорода подавляет его развитие.

Работа выполнена в рамках Проектов фундаментальных научных исследований ГАН, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/183

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРНОГО СОСТОЯНИЯ НА ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $\text{Co}_{49}\text{Ni}_{21}\text{Ga}_{30}$

Победенная З.В., Куксгаузен И.В., Куксгаузен Д.А., Киреева И.В., Чумляков Ю.И.
Сибирский физико-технический институт Национального исследовательского Томского государственного университета, Томск

В данной работе представлены исследования одностороннего эффекта памяти формы (ЭПФ) и двустороннего эффекта памяти формы (ДЭПФ) в $[1\bar{1}23]$ -монокристаллах ферромагнитного сплава $\text{Co}_{49}\text{Ni}_{21}\text{Ga}_{30}$ (ат. %), испытывающего В2-L1₀ термоупругое мартенситное превращение (МП), при деформации сжатием.

Для исследований были выбраны монокристаллы в следующих структурных состояниях. Кристаллы I – отжиг при $T = 1423$ К, 30 мин с последующей закалкой в воду. Кристаллы II – отжиг при $T = 1423$ К, 30 мин с последующей закалкой в воду + старение 623 К, 3 часа в свободном состоянии. Кристаллы III – отжиг при $T = 1423$ К, 30 мин с последующей закалкой в воду + старение 623 К, 3 часа под нагрузкой $\sigma = 150$ МПа. Установлено, что кристаллы I находятся в однофазном состоянии. Последующее старение при $T = 623$ К в течение 3 часов приводит к выделению наноразмерных частиц γ' -фазы неравноосной формы: толщина и длина частиц равны, соответственно, $w = 5-8$ нм, $d = 10-25$ нм. Так как плоскость габитуса частицы параллельна плоскости (111) В2-фазы, то в кристаллах, состаренных под нагрузкой, будет формироваться 1 вариант частиц, а в свободном состоянии – четыре.

При охлаждении/нагреве в свободном состоянии в кристаллах I и II формируется самоаккомодирующая структура, образец не изменяет размеров и ДЭПФ не наблюдается. В дальнейшем, при повышении значений напряжений $\sigma > 0$ МПа проявляется обычный ЭПФ, т.е. при охлаждении под нагрузкой при $T = M_s$ начинает расти ориентированный вариант мартенсита, с чем связана деформация. При нагреве до $T = A_s$ начинается обратное МП и при $T > A_f$ вся заданная деформация является обратимой. В отличие от кристаллов I и II, в кристаллах III при охлаждении в свободном состоянии реализуется ДЭПФ, его величина составляет $1.2(\pm 0.2)\%$. Как и в кристаллах I и II, в кристаллах III при увеличении нагрузки наблюдается ЭПФ и значения обратимой деформации при ЭПФ растут с увеличением внешних напряжений. Максимальная величина ЭПФ в кристаллах III наблюдается при $\sigma_{\text{внеш}} = 400$ МПа и составляет $\varepsilon = 2.2(\pm 0.2)\%$, тогда как в кристаллах I и II максимальная величина ЭПФ $3.8(\pm 0.2)\%$ при $\sigma_{\text{внеш}} = 125$ МПа и $2.4(\pm 0.2)\%$ при $\sigma_{\text{внеш}} = 200$ МПа, соответственно. Уменьшение ЭПФ и ДЭПФ в кристаллах II и III по сравнению с однофазным состоянием связано с выделением частиц и определяется уменьшением объема матрицы, которая испытывает МП. Частицы γ' -фазы не испытывают превращения. Электронно-микроскопически установлено, что объемная доля f частиц γ' -фазы в состаренных кристаллах составляет $20(\pm 0.3)\%$.

В кристаллах I и II так же возможно наблюдение ДЭПФ после предварительной тренировки (термоциклирование через температурный интервал МП под действием внешнего сжимающего напряжения) при $\sigma_{\text{внеш}} = 30$ МПа и $\sigma_{\text{внеш}} = 10$ МПа, соответственно. В кристаллах I максимальная величина ДЭПФ составляет $3.8(\pm 0.2)\%$ после тренировки под $\sigma_{\text{внеш}} = 250$ МПа и равна значению ЭПФ. В кристаллах II величина ДЭПФ после тренировки при $\sigma_{\text{внеш}} = 10$ МПа оказывается максимальной и равна $0.9(\pm 0.2)\%$, дальнейшее увеличение нагрузки в тренировочном цикле приводит к уменьшению значения ДЭПФ до $0.4(\pm 0.2)\%$. В кристаллах III, также как и в кристаллах II, увеличение нагрузки в тренировочном цикле приводит к уменьшению величины ДЭПФ. Таким образом, старение способствует появлению ДЭПФ при меньших внешних напряжениях в тренировочном цикле $\sigma_{\text{внеш}} = 0-10$ МПа, по сравнению с однофазными кристаллами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-33-00101 мол_а.

DOI: 10.17223/9785946218412/184

**ИССЛЕДОВАНИЕ ИМПЛАНТАЦИИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ В ПЛАЗМЕ
МЕМБРАН В ХИРУРГИЧЕСКОМ ЛЕЧЕНИИ БУЛЛЕЗНОЙ КЕРАТОПАТИИ**

Филиппова Е.О.

*Томский политехнический университет, Томск
Сибирский государственный медицинский университет, Томск*

Буллезная кератопатия является хроническим заболеванием роговицы, патогенез которого связан с уменьшением численности эндотелиальных клеток и, как следствие, утрата ими барьерной функции, что ведет к развитию отека, снижению зрения и появлению у пациента болевого симптома. Использование полупроницаемых мембран является одним из перспективных направлений в лечении данного заболевания. Особый интерес представляют трековые мембраны на основе полиэтилентерефталата (ПЭТФ). В связи с тем, что величина поверхностной энергии трековых мембран из ПЭТФ достаточно мала - 32 мДж/м², то поверхностные свойства материала, такие как степень гидрофильности, являются критичным для использования мембраны в качестве имплантата. Одним из перспективных и современных методов модификации поверхности полимерных материалов является воздействие низкотемпературной плазмы атмосферного давления.

Цель работы - изучить в эксперименте возможность применения трековых мембран модифицированных холодной плазмой в хирургическом лечении буллезной кератопатии.

Материалы и методы исследования

Образцы трековых мембран изготавливались путем облучения ионами ⁴⁰Ar⁺⁸ и химического травления пленки ПЭТФ. Модификацию поверхности полученных мембран проводили в НИ ТПУ с использованием экспериментальной установки низкотемпературной плазмы атмосферного давления. Время обработки – 30 с. После плазменной обработки мембраны были простерилизовали посредством γ -облучения радионуклидом ⁶⁰Co в дозе 1 кГр (Si).

Изучение возможности применения трековых мембран в хирургическом лечении буллезной кератопатии осуществлялось на 8 кроликах породы *Sylvilagus bachmani*. Каждому животному моделировали буллезную кератопатию путем механического повреждения и удаления эндотелия одного из глаз. Через 2 недели после развития патологического процесса в роговице, кролики были разделены на две группы: 1 группа - 4 животных, которым выполняли имплантацию трековых мембран; 2 группа – 4 животных, которым выполняли имплантацию трековых мембран после модификации в низкотемпературной плазме. В динамике эксперимента проводили наружный осмотр, фоторегистрацию результатов, оптическую когерентную томографию (ОКТ) роговицы. Спустя 8 недель от начала эксперимента глазные яблоки энуклеировали для гистологического исследования. Срезы окрашивали гематоксилином и эозином, по методу Ван-Гизона и полихромным красителем по Маллори.

Результаты и обсуждение

По данным наружного осмотра, уже через 2 недели после моделирования заболевания у всех экспериментальных животных обнаруживались признаки дистрофии роговицы, проявляющиеся в виде светобоязни, слезотечения, расширения сосудов конъюнктивы и её диффузного отека. На 7-е сутки отмечалось уменьшение светобоязни и слезотечения в обеих группах. К 4-й и 6-й неделям, согласно наружному осмотру, у всех животных наблюдалось некоторое уменьшение отека роговицы и образование сосудов.

Согласно результатам ОКТ роговицы, у всех экспериментальных животных после хирургической травмы отмечалось увеличение ее толщины в 1,4 раза по сравнению с нормой (511 мкм), составляя в среднем 720±22 мкм через 2 недели после формирования ЭЭД. На 14 день от начала лечения толщина роговицы у кроликов уменьшилась до 698±31 мкм в первой группе и до 680±29 мкм во второй (p>0,05). Через 6 недель отмечалось снижение (по

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

сравнению с показателями до лечения) толщины роговицы в 1,4 раза в первой группе и в 1,2 раза во второй.

Согласно результатам световой микроскопии, в первой группе передний эпителий был представлен пластом многослойного плоского неороговевающего эпителия. Вокруг мембраны наблюдался отек (удельный объем $18,83 \pm 5,8\%$), разволокнение и нарушение тинкториальных свойств коллагеновых волокон, появились тонкостенные сосуды с удельным объемом $3,2 \pm 2,3\%$. Отек собственного вещества роговицы был более выражен в месте имплантации материала. Между передним эпителием роговицы и мембраной коллагеновые волокна упакованы более компактно, сохраняют нормальную способность к окрашиванию. С внутренней стороны материала (между мембраной и задним эпителием) определялась грануляционная ткань с полнокровными сосудами, а также с умеренно выраженной лейкоцитарной инфильтрацией, представленной преимущественно лимфоцитами ($37,3 \pm 8,5$ клеток в поле зрения, ув. 200) и моноцитами ($8,3 \pm 2,7$ клеток в поле зрения, ув. 200). Задняя пограничная мембрана была представлена гомогенной полоской, равномерно окрашенной на всем протяжении. Задний эпителий частично отсутствовал, частично был замещен слоем отростчатых клеток.

Во второй группе передний эпителий роговицы был сохранен на всем протяжении. Передняя пограничная мембрана просматривалась слабо, местами не визуализировалась. В собственном веществе роговицы в месте имплантации мембраны, модифицированной в плазме, развивался неравномерно выраженный отек (удельный объем $14,4 \pm 6,3\%$), новообразование кровеносных сосудов (удельный объем $6,52 \pm 3,9\%$, $p < 0,05$) и лейкоцитарная инфильтрация, представленная, преимущественно лимфоцитами ($23,3 \pm 6,4$ клеток в поле зрения, ув. 200) и моноцитами ($6,0 \pm 3,2$ клеток в поле зрения, ув. 200). Коллагеновые волокна в отдельных местах при окраске пикрофуксином выглядели набухшими без четкой ориентации. Задняя пограничная мембрана была представлена гомогенной полоской и хорошо визуализировалась. Задний эпителий частично отсутствовал, частично был представлен слоем клеток отростчатой формы.

В результате проведенных исследований выявлено, что имплантация как модифицированных, так и не модифицированных в плазме трековых мембран способствует развитию продуктивной фазы инфильтративного воспаления в роговице глаза кроликов и уменьшению отека роговицы, индуцированного буллезной кератопатии. Обработка плазмой мембран незначительно увеличивает риск васкулогенеза. Результаты исследования показали перспективность предполагаемого метода в лечении данного заболевания роговицы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-315-00048.

DOI: 10.17223/9785946218412/185

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ МЕМБРАН В ХИРУРГИЧЕСКОМ ЛЕЧЕНИИ
БУЛЛЕЗНОЙ КЕРАТОПАТИИ**

^{1,2}Филиппова Е.О., ¹Иванова Н.М., ²Горбунова Е.А.

¹*Томский политехнический университет, Томск*

²*Сибирский государственный медицинский университет, Томск*

Буллезная кератопатия является хроническим заболеванием роговицы, в основе патогенеза которого лежит необратимое уменьшение численности клеток заднего эпителия и, как следствие, утрата ими барьерной и насосной функции, что ведет к развитию отека, снижению зрения и появлению у пациента болевого симптома. Использование полупроницаемых мембран является одним из перспективных направлений в лечении данного заболевания. Особый интерес представляют трековые мембраны на основе полиэтилентерефталата.

Цель работы - изучить в эксперименте возможность применения трековых мембран в хирургическом лечении буллезной кератопатии.

Материалы и методы исследования

Образцы трековых мембран изготавливались путем облучения ионами $^{40}\text{Ar}^{+8}$ и химического травления пленки полиэтилентерефталата. Мембраны стерилизовали посредством γ -облучения радионуклидом ^{60}Co в дозе 1 кГр (Si).

Изучение возможности применения трековых мембран в хирургическом лечении буллезной кератопатии осуществлялось на 4 кроликах породы *Sylvilagus bachmani* (3,5–4,0 кг). Каждому животному моделировали буллезную кератопатию путем механического повреждения и удаления эндотелия одного из глаз. Через 2 недели после развития патологического процесса в роговице, кроликам интрастромально имплантировали мембраны. В динамике эксперимента проводили наружный осмотр, фоторегистрацию результатов, оптическую когерентную томографию (ОКТ) роговицы. Спустя 8 недель от начала эксперимента глазные яблоки энуклеировали для гистологического исследования. Срезы окрашивали гематоксилином и эозином, по методу Ван-Гизона и полихромным красителем по Маллори.

Результаты и обсуждение

По данным наружного осмотра, уже через 2 недели после моделирования заболевания у всех экспериментальных животных обнаруживались признаки дистрофии роговицы, проявляющиеся в виде светобоязни, слезотечения, расширения сосудов конъюнктивы и её диффузного отека. На 7-е сутки отмечалось уменьшение светобоязни и слезотечения. К 4-й и 6-й неделям, согласно наружному осмотру, наблюдалось некоторое уменьшение отека роговицы и образование сосудов.

Согласно результатам ОКТ роговицы, у всех экспериментальных животных после хирургической травмы отмечалось увеличение ее толщины в 1,4 раза по сравнению с нормой (511 мкм), составляя в среднем 720 ± 22 мкм через 2 недели после формирования ЭЭД. На 14 день от начала лечения толщина роговицы у кроликов уменьшилась до 698 ± 31 мкм. Через 6 недель отмечалось снижение (по сравнению с показателями до лечения) толщины роговицы в 1,4 раза, причем отек, в большей степени, локализовался в месте имплантации мембраны.

Согласно результатам световой микроскопии, передний эпителий был представлен пластом многослойного плоского неороговевающего эпителия. Вокруг мембраны наблюдался отек (удельный объем $18,83 \pm 5,8\%$), разволокнение и нарушение тинкториальных свойств коллагеновых волокон, появились тонкостенные сосуды с удельным объемом $3,2 \pm 2,3\%$. Отек собственного вещества роговицы был более выражен в месте имплантации материала. Между передним эпителием роговицы и мембраной коллагеновые волокна упакованы более компактно, сохраняют нормальную способность к окрашиванию. С внутренней стороны материала (между мембраной и задним эпителием) определялась грануляционная ткань с полнокровными сосудами, а также с умеренно выраженной лейкоцитарной инфильтрацией,

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

представленной преимущественно лимфоцитами ($37,3 \pm 8,5$ клеток в поле зрения, ув. 200) и моноцитами ($8,3 \pm 2,7$ клеток в поле зрения, ув. 200). Задняя пограничная мембрана была представлена гомогенной полоской, равномерно окрашенной на всем протяжении. Задний эпителий частично отсутствовал, частично был замещен слоем отростчатых клеток.

В результате проведенных исследований выявлено, что имплантация трековых мембран способствует развитию продуктивной фазы инфильтративного воспаления в роговице глаза кроликов и уменьшению отека роговицы, индуцированного буллезной кератопатии. Результаты исследования показали перспективность предполагаемого метода в лечении данного заболевания роговицы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-315-00048.

DOI: 10.17223/9785946218412/186

СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ ПОСЛЕ ПАРОВОЙ СТЕРИЛИЗАЦИИ

Филиппова Е.О., Иванова Н.М.

Томский политехнический университет, Томск

Полимолочная кислота (ПМК) является биоразлагаемым полиэфиром молочной (2-гидроксипропионовой) кислоты, широко используемым в медицине в качестве резорбируемого шовного материала, костных пластинок, брюшных сеток, стентов, скэффолдов, а также для систем доставки лекарственных средств. Особый интерес представляет собой применение ПМК в роли кератоимплантата для лечения буллезной кератопатии – хронического заболевания роговицы, патогенез которого связан с уменьшением численности эндотелиальных клеток и, как следствие, утрата ими барьерной функции, что ведет к развитию отека, снижению зрения и появлению у пациента болевого симптома. В связи с тем, что все инструменты и изделия медицинского назначения должны подвергаться стерилизации, существуют опасения разрушения и потери нужных физико-химических свойств материала после стерилизационных процедур.

Таким образом, целью настоящего исследования является изучение топографии поверхности и свойств тонких пленок на основе полимолочной кислоты после паровой стерилизации.

Материалы и методы исследования

Исходные образцы пленок были получены в результате растворения ПМК с молекулярным весом, $M_w=121000$ г/моль (PURASORB® PL 10, Нидерланды) в трихлорметане ($CHCl_3$) (Экрос, Россия). Через 48 часов, после испарения растворителя, сформированные полимерные пленки удалялись из чашки Петри.

Стерилизация производилась с помощью парового автоматического стерилизатора ГПа-10 ПЗ (Россия) в двух режимах: $130^\circ C - 132^\circ C$ при давлении 0,2 МПа – 5 минут; $120^\circ C - 121^\circ C$ при давлении 0,11 МПа – 20 минут.

Электронная микроскопия поверхности образцов ПМК выполнялась на микроскопе Hitachi S3400N Type II (Япония). Данные о строении поверхности пленок и ее шероховатости были получены с помощью лазерного сканирующего микроскопа «Olympus Lext Ols 4100» (США). Профиль шероховатости поверхности строился с точностью до 1 нм в программе Gwyddion 2.47. Расчет параметров шероховатости, описывающих топографию поверхности, проводился согласно ГОСТ 2789–73 и ISO 4287:1997. Измерения ИК-спектров исходных пленок на основе ПМК и пленок после стерилизации производились с помощью ИК-Фурье спектрометра Nicolet 5700 (США). Краевой угол смачивания измерялся методом сидячей капли при комнатной температуре (25 ± 2) $^\circ C$, с помощью прибора «KRÜSS Easy Drop DSA 20» (Германия). В исследовании использовались три жидкости: деионизованная вода, глицерин, и N-гексан.

Результаты и обсуждение

Исследование структуры и морфологии пленок из ПМК показало, что шероховатость и топография полученного материала зависит от стороны поверхности: внешняя, контактирующая с атмосферой, сторона имела более рельефную поверхность в отличие от более гладкой, контактирующей с чашкой Петри, внутренней.

Исследование шероховатости поверхности показало среднюю шероховатость (R_a) внешней стороны пленки 0,17 мкм, внутренней – 0,01 мкм, среднеквадратичную шероховатость (R_q) внешней стороны 0,4 мкм, внутренней – 0,014 мкм, максимальную высоту шероховатости (R_z) внешней стороны 4 мкм, внутренней – 0,18 мкм.

Анализ данных исследований смачиваемости поверхности показал, что внутренняя сторона образцов пленки обладает краевым углом смачивания воды $80,5^\circ \pm 1,2$, внешняя – $78,5^\circ \pm 1,3$, т.е. свойства материала приближены к гидрофобным. Поверхностная энергия γ

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

пленок варьируется в пределах (26÷27) мДж/м², причем вклад дисперсионной составляющей значительней поляризационной.

Стерилизация увеличивает среднюю шероховатость R_a внутренней стороны поверхности пленок на основе ПМК в 5 раз по сравнению с исходными пленками, при этом различия параметра R_a между сторонами статистически значимы ($p < 0,01$), как и в случае с исходными пленками. Среднеквадратичная шероховатость поверхности пленок (R_q), максимальная высота шероховатости (R_t), средняя максимальная высота профиля (R_z) возрастают после стерилизации более чем в 7 раз.

Исследование смачивания показало, что паровая стерилизация увеличивает гидрофильность пленки, снижая краевой угол смачивания внутренней стороны на 14° – 15° (на (17 – 18)%), а также увеличивает значения поверхностной энергии преимущественно за счет полярной составляющей до (18,1±0,4) [мДж/м²]. Статистический анализ показал, что значимых различий краевого угла смачивания, а также поверхностной энергии между образцами стерилизованных при двух температурных режимах не выявлено, $p > 0,05$.

Анализ ИК – спектров показал, что паровая стерилизация пленок на основе ПМК не приводит к заметному изменению их ИК поглощения, тем не менее, способствует уширению характерных полос 2996 см⁻¹ и 2944 см⁻¹, обусловленных симметричными и асимметричными колебаниями νCH_3 , а также валентными колебаниями карбонильной группы $\text{C} = \text{O}$ в области 1768 см⁻¹.

В результате проведенных исследований выявлено, что вылитые пленки на основе ПМК имеют топографически разные стороны поверхности: более рельефную – внешнюю и гладкую внутреннюю, что отражается в параметрах шероховатости. Стерилизация горячим паром под давлением значительно (в 5 раз) увеличивает шероховатость пленок на основе ПМК. Пленки на основе ПМК обладают свойствами, близкими к гидрофобным, независимо от стороны поверхности. Паровая стерилизация увеличивает гидрофильность материала, снижая краевой угол смачивания на 14° – 15° (на 17 – 18%), а также увеличивает значения поверхностной энергии в большей мере за счет полярной составляющей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-415-703005.

DOI: 10.17223/9785946218412/187

МЕТАЛЛОПОРШКОВАЯ КОМПОЗИЦИЯ НА ОСНОВЕ БИМОДАЛЬНОГО ПОРОШКА КОРРОЗИОННОСТОЙКОГО СПЛАВА 316L

¹Торопков Н.Е., ¹Глазкова Е.А., ¹Родкевич Н.Г.,

¹Первиков А.В., ¹Лернер М.И., ²Мужецкая С.Ю.

¹Институт физики прочности и материаловедения

Сибирского отделения Российской академии наук, Томск

²ООО «ПЕРЕДОВЫЕ ПОРОШКОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ», Томск

Технология литья металлопорошковых композиций под давлением (Powder injection molding (PIM)) хорошо себя зарекомендовала для производства деталей сложной формы. В последнее время при разработке металлопорошковых композиции (фидстоков) большое внимание уделяется использованию бимодальных порошков, содержащих как нано-, так и микрочастицы [1]. Применение бимодальных порошков приводит к снижению температуры спекания, увеличению плотности спеченных деталей, улучшению механических свойств, снижению усадки и шероховатости поверхности деталей [2]. Немаловажную роль играет выбор связующего, которое должно обеспечивать высокую текучесть, пластичность композиции, хорошую прочность «зеленых» образцов и эффективный дебиндинг. Это достигается использованием многокомпонентного связующего, включающего полимеры, пластификаторы и поверхностно-активные вещества. Целью работы является исследование влияния состава связующего на свойства металлопорошковой композиции, а также режимы формования и спекания сложнопрофильных деталей, полученных методом литья под давлением.

Бимодальные порошки, полученные электрическим взрывом стальной проволоки сплава 316L, представлены наночастицами размером 70 – 130 нм и микрочастицами размером 1 – 5 мкм (рисунок 1). При использовании бимодальных порошков, включающих нано- и микрочастицы могут возникнуть трудности, связанные с окислением и агломерацией наночастиц. Поэтому перед использованием проводили деагломерацию и микрокапсуляцию бимодального порошка в растворе поверхностно-активного вещества – 1,5-диаминоантрахинона. Кроме того, в состав связующего входит термопластичные полимеры – полиметилметакрилат (ПММА) и полиэтилен низкой плотности (PE-LD), пластификатор дибутилфталат и парафин, применяемый для снижения температуры плавления связующего. Содержание связующего в металлопорошковой композиции составляло 7-9 мас. %.

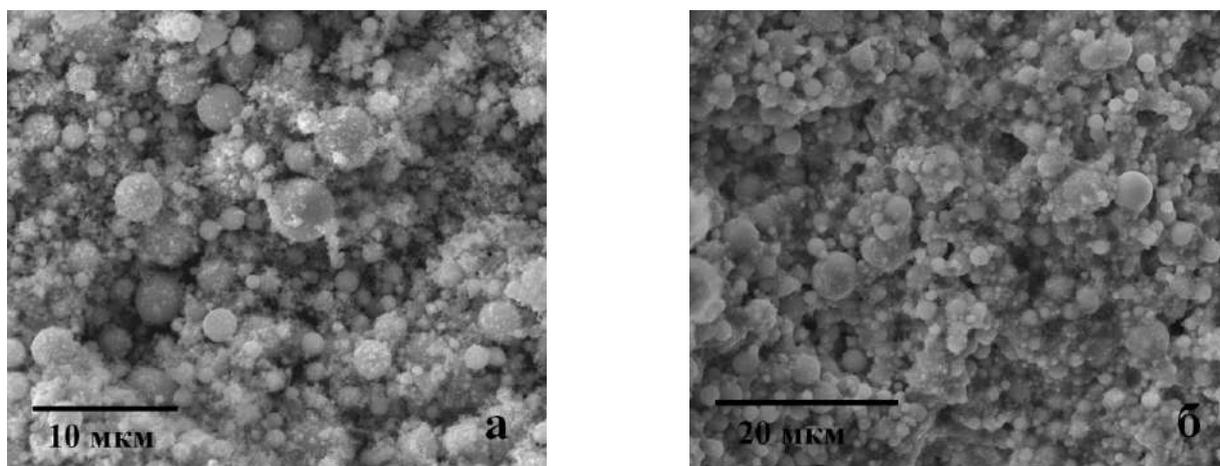


Рис. 1. СЭМ-изображения бимодального порошка сплава 316L (а) и излома гранулы фидстока (б)

Увеличение содержания ПММА в связующем от 5 до 30 об.% приводит к росту температуры плавления фидстока от 140 до 200 °С. Следует отметить, что формованные изделия с содержанием ПММА 5–10 об.% деформировались при извлечении из прессформы. Содержание ПММА 15–30 об.% обеспечивает достаточную жесткость формованных изделий.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Повышенное содержание ПММА приводит к увеличению прочности «коричневых» образцов после дебиндинга. Однако, повышение температуры плавления фидстока до 200 °С нежелательно из-за деградации парафина и PE-LD при формовании изделий. Оптимальное содержание ПММА в связующем – 15–20 об.%. При формовании деталей при 165 °С и давлении 5–7 МПа достигается бездефектное заполнение прессформы.

Для определения режимов удаления связующего проводили синхронный термический анализ фидстока с оптимальным составом связующего (15 об.% ПММА) в интервале температур 25–1000 °С при скорости нагрева 10 °С/мин (рис. 2).

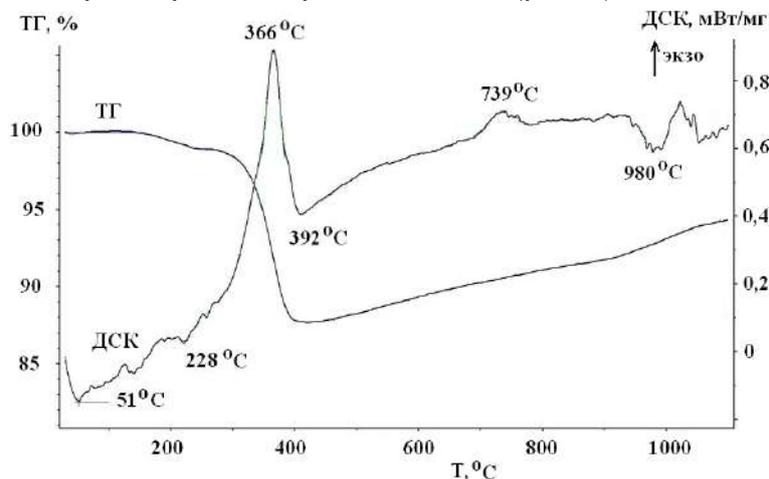


Рис. 2. Синхронный термический анализ металлопорошковой композиции

С учетом данных термического анализа дебиндинг образцов проводили на воздухе, в атмосфере азота и в вакууме: при скорости нагрева – 1 °С/мин, температуре – 210 °С, времени обработки – 90 мин. Минимальное содержание углерода в образцах достигается при обработке образцов в вакууме. Спекание образцов в вакууме при 1300 °С позволяет получать изделия с плотностью более 0,95. Зависимость плотности и усадки спеченных образцов от содержания ПММА в связующем проходит через максимум, при содержании ПММА 15 мас.% достигается плотность 0,98, усадка при спекании составляет 23 %.

Таким образом, использование многокомпонентного связующего для получения металлопорошковой композиции на основе бимодальных порошков сплава 316L позволяет оптимизировать процесс получения фидстока, а также режимы формования и спекания изделий для достижения максимальной плотности спеченных изделий 0,98 от теоретической плотности сплава.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Соглашение № 14.604.21.0158, идентификационный номер проекта RFMEFI60417X0158).

1. J.W. Oh, R. Bollina, W.S. Lee, S.J. Park. Effect of nanopowder ratio in bimodal powder mixture on powder injection molding // Powder Technology. 2016. 302. P. 168–176.
2. J. Rajabi, N. Muhamad, A.B. Sulong, A. Fayyaz, M.R. Raza. The effect of nano-sized stainless steel powder addition on mechanical and physical properties of micropowder injection molded part // Materials and Design. 2014. 63. P. 223–232.

DOI: 10.17223/9785946218412/188

СТРУКТУРА И ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПОЛЗУЧЕСТИ СПЛАВА СИСТЕМЫ Zr-Nb-H, ОБЛУЧЕННОГО ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

¹Степанова Е.Н., ²Грабовецкая Г.П., ²Мишин И.П., ³Тересов А.Д.

¹*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

²*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

³*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт сильноточной электроники Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

enstepanova@tpu.ru

В последнее время в области модифицирования поверхности металлических поликристаллов все большее применение находят методы обработки, связанные с использованием электронных пучков. Радиационное, тепловое и ударно-механическое воздействия в процессе электроннолучевой обработки могут приводить к накоплению дефектов в поверхностном слое металлических поликристаллов, появлению метастабильных фаз и формированию нанокристаллической структуры. При этом существенное влияние на формирующуюся в поверхностном слое структуру может оказать присутствие в сплаве водорода. Структура поверхности, имеющая высокую плотность дефектов и содержащая метастабильные фазы, может оказаться нестабильной в процессе эксплуатации при повышенных температурах. Неустойчивость модифицированного слоя к воздействию температуры в присутствии водорода особенно ярко проявляется при малых скоростях деформации, характерных для ползучести, при которых высока роль диффузии и диффузионно-контролируемых процессов в развитии пластической деформации.

В работе проведено сравнительное исследование влияния облучения импульсным электронным пучком на закономерности ползучести сплавов Zr-1мас.%Nb-0,004мас.%H (далее сплав Zr-1Nb) и Zr-1мас.%Nb-0,25мас.%H (Zr-1Nb-0,25H) при температуре 673 К в интервале скоростей $10^{-7} - 10^{-5} \text{ с}^{-1}$.

В исходном состоянии сплав Zr-1Nb является двухфазным и содержит кроме основной фазы αZr фазу βNb (твердый раствор Zr на основе Nb), которая в виде частиц, размерами 0,5-2 мкм, наблюдается на границах и в объеме зерен. Сплав Zr-1Nb-0,25H кроме указанных фаз содержит гидриды ZrH и ZrH₂. Согласно оценке по уширению на полувысоте рентгеновских максимумов с применением аппроксимации Коши значения микроискажений кристаллической решетки фазы $\alpha\text{-Zr}$ сплавов Zr-1Nb и Zr-1Nb-0,25H составляют $3,2 \cdot 10^{-4}$ и $1,4 \cdot 10^{-3}$, а плотность дислокаций в зернах – $1,6 \cdot 10^{13}$ и $3,0 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, соответственно.

В результате облучения в режиме плавления в поверхностном слое сплавов Zr-1Nb и Zr-1Nb-0,25H шириной 8-10 мкм формируется свободная от частиц фазы $\beta\text{-Nb}$ пластинчатая $\alpha+\alpha'$ структура с поперечным размером пластин 20-300 нм. После облучения в модифицированном слое в сплаве Zr-1Nb микроискажение кристаллической решетки увеличилось до $1,3 \cdot 10^{-3}$, а плотность дислокаций - до $2,6 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$. В сплаве Zr-1Nb-0,25H значения микроискажения кристаллической решетки и плотности дислокаций изменяются незначительно – до $2,0 \cdot 10^{-3}$ и $6,1 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, соответственно. Облучение сплавов Zr-1Nb и Zr-1Nb-0,25H приводит к уменьшению скорости установившейся ползучести и величины деформации до разрушения при увеличении времени до разрушения. Зависимость скорости ползучести на установившейся стадии от напряжения облученных сплавов Zr-1Nb и Zr-1Nb-0,25H при 673 К удовлетворительно описывается степенным законом ползучести. Значения показателя чувствительности к напряжению свидетельствуют о том, что основным механизмом деформации сплавов Zr-1Nb и Zr-1Nb-0,25H в рассматриваемых условиях ползучести является переползание дислокаций, контролируемое объемной самодиффузией циркония.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 18-08-00158.

DOI: 10.17223/9785946218412/189

КОАЛЕСЦЕНЦИЯ ДЕТОНАЦИОННОГО УГЛЕРОДА ПРИ УЛЬТРАЗВУКОВОМ ОБЛУЧЕНИИ В КАВИТАЦИОННОМ РЕЖИМЕ

Верещагин А. Л., Бычин Н.В., Кудряшова О.Б., Петров Е.А.

Бийский технологический институт (филиал)

Алтайского государственного технического университета, Бийск, РФ

Сонохимия позволяет осуществлять синтез новых материалов или обеспечивает новые методы получения известных материалов без необходимости использования высоких температур, давлений или длительными временами синтеза. Для осуществления как химических, так и физические явления при производстве или модификации наноматериалов необходимо применять ультразвук высокой интенсивности.

Принимая во внимание такой мощный синтетический потенциал кавитационных процессов было установлено образование в них метастабильных нанофаз углерода – в процессах гидродинамической, акустической и электроразрядной кавитации.

Целью данной работы является изучение влияния ультразвуковой обработки на дисперсность детонационного углерода в устойчивых масляных суспензиях.

По экспериментальным оценкам при используемой частоте ультразвука 20 кГц кавитационные пузырьки имеют размер порядка 170 мкм. Отсюда следует, что в нашем эксперименте ультразвуковая обработка суспензий создает, главным образом, режим дезагрегации кластеров наночастиц.

Для ультразвуковой обработки были приготовлены суспензии детонационного углерода, состоящего из неалмазной и алмазной фаз углерода (ДУ) в полусинтетическом моторном масле 10w40 с массовой долей УДАГ 1 и 2,5%.

Диспергирование осуществлялось ультразвуковой обработкой с частотой 22 кГц и интенсивностью ультразвукового воздействия 8 Вт/см² ультразвуковым технологическим аппаратом УЗТА-0,15/22-О (вариант исполнения №1) в стеклянном сосуде.

Определение гранулометрического состава полученных масляных суспензий проводилось с помощью микроскопа Olympus Omec DC130. Выпадавшие осадки анализировались методом сканирующей электронной микроскопии JSM-840 Jeol.

Представленные данные указывают на двойственное поведение частиц детонационного углерода под действием ультразвукового облучения. На первом этапе происходит диспергирование частиц примерно в 4 раза – с 8 мкм до 2 мкм (для 1% суспензии). Последующее облучение привело к росту частиц до 8,9 мкм. Для суспензии с массовой долей 2,5% УДАГ коалесценция частиц была более существенной – наблюдался рост с 2 до 21,2 мкм, что можно связать с увеличением числа активных столкновений. Коалесценция частиц УДАГ может быть объяснена большим запасом поверхностной энергии и ее минимизацией при росте частиц.

Исследование осадка методом СЭМ показало образование отдельных частиц углеродной фазы неправильной формы размером 2x20 мкм.

Таким образом, показано, что при ультразвуковой обработке масляных суспензий детонационного углерода происходит его диспергирование, за которым следует рост частиц и увеличение массовой доли ДУ в суспензии увеличивает размер образующихся частиц.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-29-19070 мк.

DOI: 10.17223/9785946218412/190

АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ НАНОЧАСТИЦ CuFe_2O_4 , ПОЛУЧЕННЫХ СОВМЕСТЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ВЗРЫВОМ Fe и Cu ПРОВОЛОЧЕК В КИСЛОРОДСОДЕРЖАЮЩЕЙ АТМОСФЕРЕ

*Фоменко А.Н., Кондранова А.М., Казанцев С.О., Ложкомоев А.С., А.В. Первигов
Институт Физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

Suresh et al с соавторами [1] интенсивно исследовали оксиды металлов, такие как феррит кобальта, феррит никеля, феррит цинка, феррит меди для биомедицинских применений из-за их уникальных ферромагнитных свойств. В последнее время феррит меди (CuFe_2O_4) становится универсальным материалом благодаря своим интересным магнитным и электрическим свойствам, помимо химической и термической стабильности. Наночастицы (НЧ) феррита меди также использовались в биомедицине и биотехнологии в качестве контрастных веществ в магнитно-резонансной томографии (МРТ) и для доставки лекарств с магнитным наведением. Наночастицы ферритов металлов с высокой эффективностью могут подавлять жизнедеятельность патогенной микрофлоры [2,3]. Существуют данные об антимикробном действии ферритов цинка, никеля, кобальта [4,5]. Также в литературе представлены данные о антимикробных свойствах ферритов меди замещенных различными металлами [6,7].

В данной работе рассмотрена возможность получения наночастиц феррита меди методом электрического взрыва Fe и Cu проволок в кислородсодержащей атмосфере при различных значениях введенной в проводники энергии (от 1 до 2,2 энергии сублимации металлов), исследованы их физико-химические характеристики и антимикробная активность по отношению к грамположительным и грамотрицательным микроорганизмам. Синтезированные ферритовые наночастицы были охарактеризованы методами рентгенофазового анализа (XRD-6000, Shimadzu, Япония), низкотемпературной адсорбции азота (Сорбтометр М, Катакон, Россия), просвечивающей электронной микроскопии (JEM-100, JEOL, Япония) с интегрированной системой энергодисперсионного анализа (X-Max, Oxford Instruments, GB). Антибактериальные свойства наночастиц феррита меди по отношению к *E.coli* ATCC 25 922 и *MRSA* ATCC 43300 исследовали путем определения минимальной ингибирующей концентрации (МИС).

По данным рентгенофазового анализа продуктами взрыва, вне зависимости от введенной энергии, являются наночастицы со структурой CuFe_2O_4 . Исследования наночастиц феррита меди методом просвечивающей электронной микроскопии показало, что все образцы имеют сферическую форму. Медь и железо равномерно распределены по частицам. Размер и удельная поверхность приведены в таблице 1.

Тестирование НЧ феррита меди на антимикробную активность выявило, что образцы CuFe_2O_4 , полученные при меньших значениях введенной энергии ингибируют рост бактерий хуже, что вероятно связано с большим размером образующихся частиц. По отношению к *MRSA* CuFe_2O_4 (2,2) оказывает наибольший антимикробный эффект в концентрации 0,5 мг/мл (таблица 1).

Таблица 1 - Значения МИС (мг/мл) для наночастиц феррита меди

Название образца	Удельная поверхность, $\text{м}^2/\text{г}$	Размер наночастиц, нм	Значения МИС (мг / мл)	
			<i>E.coli</i> ATC C 25 922	<i>MRSA</i> ATCC 43300
CuFe_2O_4 (1)	6,37	54	0,5	1
CuFe_2O_4 (1,5)	9,90	47	0,1	1
CuFe_2O_4 (2,2)	9,88	45	0,1	0,5

Таким образом, совместный электрический взрыв Fe и Cu проволок в кислородсодержащей атмосфере позволяет получать наночастицы феррита меди (CuFe_2O_4) с

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

антимикробными свойствами. Полученные наночастицы CuFe_2O_4 являются перспективными для использования в качестве покрытий медицинских устройств, для предотвращения роста микробной биопленки, систем доставки лекарств, мазей, косметики, кремов и лосьонов для местного применения и требуют более глубокого исследования структурных и биологических характеристик.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Suresh R. , Moganavally P. , Deepa M. Synthesis and characterization of nickel ferrites nanoparticles// Int. J. ChemTech Res.2015. №8 (5). p.113–116
2. Ansari M. A. et al. Synthesis and Characterization of Antibacterial Activity of Spinel Chromium-Substituted Copper Ferrite Nanoparticles for Biomedical Application //Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials. – 2018. – Т. 28. – №. 6. – С. 2316-2327.
3. Sanpo N. et al. Antibacterial properties of spinel ferrite nanoparticles //Microbial pathogens and strategies for combating them: science, technology and education. Spain: Formatex Research Centre. – 2013. – С. 239-250.
4. Ashour A. H. et al. Antimicrobial activity of metal-substituted cobalt ferrite nanoparticles synthesized by sol-gel technique //Particuology. – 2018. – Т. 40. – С. 141-151.
5. Suppuraj P. et al. Facile Synthesis of Spinel Nanocrystalline ZnFe_2O_4 : Enhanced Photocatalytic and Microbial Applications //Materials Science and Applied Chemistry. – 2017. – Т. 34. – №. 1. – С. 5-11.
6. Elayakumar K. et al. Enhanced magnetic property and antibacterial biomedical activity of Ce^{3+} doped CuFe_2O_4 spinel nanoparticles synthesized by sol-gel method //Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – Т. 478. – С. 140-147.
7. Ansari M. A. et al. Synthesis and Characterization of Antibacterial Activity of Spinel Chromium-Substituted Copper Ferrite Nanoparticles for Biomedical Application //Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials. – 2018. – Т. 28. – №. 6. – С. 2316-2327

DOI: 10.17223/9785946218412/191

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ОБРАБОТКИ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ И СТАТИЧЕСКИЕ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В ПРИПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ Cr-Mn-N АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ

¹Наркевич Н.А., ¹Сурикова Н.С., ¹Перевалова О.Б., ¹Власов И.В.,
²Наркевич В.В., ¹Дерюгин Е.Е.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*
²*Томский политехнический университет, Томск*

Структура, фазовый и химический состав приповерхностного слоя определяют свойства металлических материалов при механическом и трибологическом нагружении [1]. Для упрочнения поверхности сталей и сплавов широко применяются деформационные обработки [2-4], при проведении которых измельчение структуры до наноразмерной и инициированные деформированием фазовые превращения сопровождаются локальным нагревом поверхности и окислением. Обработка лазерным или электронным пучком тоже вызывает изменение химического и фазового состава [5], а также напряженного состояния в приповерхностном слое [6]. Представляет научный и практический интерес исследование химического состава, структуры и статических смещений атомов кристаллической решетки, вызывающих микронапряжения III рода, в приповерхностном слое стали после комбинированной механотермической обработки, включающей поверхностное пластическое деформирование и, затем, электронно-лучевую обработку.

Исследовали аустенитную нержавеющую сталь Fe-16.5Cr-18.8Mn-0.53N-0.07C. В одной серии экспериментов после закалки от 1100^oC поверхность стали упрочняли ультразвуковой ковкой (УЗК) [2,3], в другой - фрикционной обработкой (ФО) [4]. После деформационных обработок проводили обработку (ЭЛО) на электронно-лучевой установке (ИФПМ СО РАН, Россия) непрерывным сфокусированным электронным пучком при остаточном давлении $P = 0,1$ Па. Технологические параметры ЭЛО: частота сканирования электронного луча 200 Гц, ток электронного луча $I = 0,02$ А, максимальная энергия электронов $E = 27$ кэВ, скорость перемещения обрабатываемых образцов относительно электронного луча $V = 15$ мм/с. Изменение химического состава приповерхностного слоя образцов изучали методом Оже-электронной спектроскопии (AES «Шхуна-2», Россия). Параметры структуры и углы разориентации элементов структуры были оценены EBSD методом на приборе Quanta 3D. Топографию поверхности исследовали на профилометре New View (Zygo, США). Статические смещения атомов ГЦК решетки определяли из анализа соотношения интенсивностей пар дифракционных максимумов (200)-(400) и (111)-(222) методом рентгеновской дифракции в $Cu_{K\alpha}$ излучении. Износостойкость определяли при испытаниях по схеме шарик/диск с нагрузкой 3 Н при скорости скольжения шарика из ВК6 30 мм/с и числе оборотов $n = 6000$.

Исследования показали, что приповерхностный слой стали после деформационных обработок (ФО и УЗК) на глубине до 300 нм сильно обогащен кислородом. Последующая ЭЛО поверхности оказывает рафинирующее действие. Так, при проведении ФО с последующей ЭЛО, концентрация кислорода на глубине 50 нм уменьшается примерно в 10 раз. После УЗК с последующей ЭЛО концентрация кислорода в поверхностном слое уменьшается только на 25%, а на глубине 50 нм примерно в 3 раза. Таким образом, при одинаковых параметрах ЭЛО рафинирование после УЗК менее эффективно, чем после ФО. Больше удаление кислорода из приповерхностного слоя после ФО достигается благодаря топографическим особенностям поверхности, сформированной скользящим индентором. Более мелкие и неглубокие выступы ($R_a = 0,4$ мкм) при обработке электронным лучом быстрее прогреваются до оплавления, чем бугры ($R_a = 3,6$ мкм) в отчеканенной УЗК поверхности. После ФО и последующей ЭЛО происходит полная перекристаллизация с образованием мелкозернистой — 2 мкм структуры и преимущественно высокоугловыми границами. Приповерхностный слой, упрочненный УЗК, при тех же параметрах последующей ЭЛО нагревается ниже температур ликвидуса. При этом в основном сохраняется дефектная структура, сформированная УЗК, которую можно

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

охарактеризовать как субзеренную с преимущественно малоугловыми границами. Доля малоугловых границ с разориентацией ≤ 5 градусов составляет 65%. Рафинирование поверхностного слоя ЭЛО без оплавления менее эффективно, так как удаляется только 20-25% кислорода.

Повышенное содержания кислорода в приповерхностном слое коррелирует с увеличением смещений атомов в ГЦК решетке. В величине смещений наблюдается анизотропия: в направлении $\langle 100 \rangle$ величина смещений атомов в решетке аустенита больше, чем в направлении $\langle 111 \rangle$, таблица 1. Рафинирование при обработке электронным лучом уменьшает смещения атомов в ГЦК решетке.

Таблица 1. Статические смещения атомов в ГЦК решетке $\sqrt{\langle u^2 \rangle}/4$, формирующие микронапряжения III рода в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$

Вид обработки	$\langle 100 \rangle \sqrt{\langle u^2 \rangle}/4$, нм	$\langle 111 \rangle \sqrt{\langle u^2 \rangle}/4$, нм
Закалка	0.0042	0
Фрикционная обработка	0.0059	0.0047
Фрикционная обработка + электронно-лучевая обработка	0.0052	0.0012
Ультразвуковая ковка	0.0046	0.0027
Ультразвуковая ковка + электронно-лучевая обработка	0.0044	0.0020

Увеличение смещений атомов в ГЦК решетке является проявлением ее неустойчивости и связано с предмартенситными явлениями [7]. Результаты [3] и других работ показывают, что при интенсивном пластическом деформировании стали того же состава, что и в настоящей работе, образуется ϵ -мартенсит с ГПУ решеткой. Следовательно, нестабильность решетки может свидетельствовать о предпосылках к облегченному $\gamma \rightarrow \epsilon$ превращению при механическом и трибологическом нагружении. Прослеживается взаимосвязь между величиной статических смещений атомов в ГЦК решетке и сопротивлением изнашиванию. Так, износостойкость стали после ФО в 1,5 раза выше, чем для закаленной стали, после УЗК - в 1,3 раза. Еще большее увеличение износостойкости (до 100 крат) показывает комбинирование обработок типа: ФО + ЭЛО и УЗК + ЭЛО.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук России на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Панин В.Е., Панин А.В. Эффект поверхностного слоя в деформируемом твердом теле // Физ. мезомех. 2005. Т. 8. № 5. С. 7-15.
2. Сурикова Н.С., Наркевич Н.А., Суриков Н.Ю., Власов И.В., Овчинников С.В., Миронов Ю.П., Гриценко Б.П. Влияние ультразвуковой ударной обработки на механические свойства монокристалла никелида титана // ФММ. 2016. Т. 117. № 10. С. 1096-1104.
3. Наркевич Н.А., Шулепов И.А., Миронов Ю.П. Структура, механические и триботехнические свойства аустенитной азотистой стали после фрикционной обработки // ФММ. 2017. Т. 118. № 4. С. 421-428.
4. Макаров А.В., Коршунов Л.Г. Металлофизические основы наноструктурирующей фрикционной обработки сталей // ФММ. 2019. Т.120. № 3. С. 327-336.
5. Meisner L.L., Markov A.B., Rotshtein V.R. Ozur G.E., Meisner S.N., Yakovlev E.V., Semin V.O., Mironov Yu.P., Poletika T.M., Girsova S.L., Shepel D.A. Microstructural characterization of Ti-Ta-based surface alloy fabricated on TiNi SMA by additive pulsed electron-beam melting of film/substrate system // J. Alloys and Comp. 2018. V. 730. P. 376-385.
6. Наркевич Н.А., Дураков В.Г., Сурикова Н.С., Миронов Ю.П., Мельников А.Г., Перевалова О.Б., Шугуров А.Р., Шулепов И.А., Наркевич В.В. Структура и деформации кристаллической решетки в поверхностном слое Cr-Mn-N стали, сформированном комбинированием фрикционной и электронно-лучевой обработок // ФММ. 2019. Т.120. № 10.
7. Михайлов Ю.Н., Дубинин С.Ф. Длинноволновые статические смещения атомов в сплавах ГАММА-FeNi // ФТТ. 2004. Т.46. №12. С. 2113-2118.

DOI: 10.17223/9785946218412/192

КИНЕТИКА РОСТА ПОВЕРХНОСТНОЙ ОКАЛИНЫ В ПРОЦЕССЕ ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ СПЛАВА V–Cr–Ta–Zr

^{1,2}Смирнов И.В., ²Цверова А.С., ^{1,2}Гриняев К.В.,

^{1,2}Тюменцев А.Н., ³Чернов В.М., ^{1,2}Дитенберг И.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

³*АО Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов им. академика А.А. Бочвара (АО «ВНИИНМ»), Москва*

Проведено исследование кинетики роста поверхностной окалины на образцах сплава системы V–Cr–Ta–Zr в зависимости от особенностей структурного состояния.

Дефектное структурное состояние способствует существенному (на десятки процентов) увеличению скорости окисления образцов сплава V–Cr–Ta–Zr при малых (до 60 мин.) временах химико-термической обработки на воздухе.

Установлено, что начальные стадии (до 90 минут включительно), вне зависимости от микроструктуры образцов, характеризуются более высокой скоростью окисления, по сравнению с длительными обработками.

Формирующаяся при окислении поверхностная окалина состоит из чешуек окисла V₂O₅ пластинчатой формы и характеризуется наличием открытой пористости.

Высказано предположение, что снижение скорости окисления является следствием увеличения толщины окалины, способствующей замедлению подвода кислорода к поверхности образцов сплава V–Cr–Ta–Zr, на которой протекают процессы зарождения и роста чешуек.

Исследования проведены с использованием оборудования Томского материаловедческого центра коллективного пользования НИ ТГУ. Химико-термические обработки выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-08-00213_A). Изучение микроструктуры проведено в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/193

БИОДЕГРАДИРУЕМЫЕ СОСУДИСТЫЕ ЗАПЛАТЫ ИЗ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА, СОДЕРЖАЩИЕ СОСУДИСТЫЙ ЭНДОТЕЛИАЛЬНЫЙ ФАКТОР РОСТА, ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ АНГИОПЛАСТИКИ

¹Севостьянова В.В., ^{1,2}Миронов А.В., ¹Кривкина Е.О., ¹Ханова М.Ю., ¹Великанова Е.А.,
¹Матвеева В.Г., ¹Глушкова Т.В., ¹Антонова Л.В., ¹Барбараш Л.С.

¹Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Научно-исследовательский институт комплексных проблем
сердечно-сосудистых заболеваний», Кемерово

²Государственное бюджетное учреждение здравоохранения Кемеровской области
«Кемеровский областной клинический кардиологический диспансер имени академика Л.С.
Барбараша», Кемерово

Ежегодное увеличение случаев острого нарушения мозгового кровообращения среди населения приводит к непрерывному росту числа операций каротидной эндартерэктомии для восстановления проходимости сонной артерии [1]. На сегодняшний день в клинической практике для закрытия разреза при каротидной эндартерэктомии предпочтение отдается использованию заплат из природных или синтетических материалов таких, как аутовена, ксеноперикард, политетрафторэтилен, полиэтилентерефталат и другие. Однако применение существующих сосудистых заплат может быть сопряжено с рядом осложнений: тромбозом, аневризмами и рестенозом. Проблема отсутствия высоко биосовместимых заплат для ангиопластики может быть решена с помощью создания материалов с выраженной способностью использовать регенеративный потенциал организма и восстанавливать структуру сосудистой стенки. **Целью** настоящего исследования стала оценка эффективности применения биодеградируемого материала на основе поликапролактона, содержащего сосудистый эндотелиальный фактор роста, в качестве сосудистых заплат, стимулирующих регенерацию стенки кровеносного сосуда.

Материалы и методы. Сосудистые заплаты изготавливали методом эмульсионного электроспиннинга из смеси (20:1) 14% раствора поликапролактона (PCL) в трихлорметане и раствора сосудистого эндотелиального фактора роста (VEGF) в физиологическом растворе (10 мкг/мл) при напряжении – 18 кВ, расстоянии до коллектора – 15 см, скорости подачи раствора – 0,5 мл/ч. При оценке свойств заплат из PCL/VEGF проводили их сравнение с заплатами из чистого PCL, изготовленных методом электроспиннинга, и коммерческими заплатами из бычьего ксеноперикарда (КемПериплас-Нео, ЗАО НеоКор). Морфологию заплат изучали на сканирующем электронном микроскопе S-3400N (Hitachi). Исследование механических свойств заплат осуществляли в условиях одноосного растяжения на универсальной испытательной машине (Zwick/Roell), при использовании внутренней грудной артерии человека (a.mammaria) и аорта крысы в качестве контроля. Для оценки возможности использования изучаемых заплат в ангиопластике их имплантировали в стенку брюшной аорты самцов крыс популяции Wistar весом 400-450 г (n=18). Через 1, 3, 6 и 12 месяцев после имплантации заплаты из PCL/VEGF, PCL и ксеноперикарда эксплантировали и изучали гистологическими (эозин и гематоксилин, Ван-Гизон, ализариновый красный С) и иммуногистохимическими (CD31, CD34, vWF, коллаген I и IV типов) методами.

Результаты. Сканирующая электронная микроскопия сосудистых заплат показала, что образцы из PCL с введенным VEGF были образованы более тонкими волокнами по сравнению с образцами из чистого PCL. Полимерные волокна формировали высокопористую структуру в материалах обоих видов. В свою очередь, ксеноперикард имел гладкую внутреннюю поверхность. По данным механических испытаний заплаты PCL/VEGF обладали более низкими прочностными свойствами относительно материала из чистого PCL (p<0,05) и ксеноперикарда (p<0,05) (Таблица 1). Также, наблюдали снижение относительного удлинения в 8,47 раз (p<0,05) у PCL/VEGF по сравнению с PCL без изменения жесткости материала в

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

пределах малых деформаций. При этом не отмечали различий по прочности между PCL/VEGF, аутоартерией и аортой крысы.

Таблица 1. Механические свойства сосудистых заплат и нативных кровеносных сосудов

	Предел прочности, МПа М (25-75%)	Относительное удлинение, % М (25-75%)	Модуль Юнга, МПа М (25-75%)
PCL/VEGF	2,3 (1,98-2,35) ^{#■}	105,74 (93,77-108,38) ^{*#}	13,4 (13,2-14,0)
PCL	4,27 (4,2-4,29)	890,03 (880,76-899,44) ^{*■}	18,15 (17,35-18,3) ^{●■}
Ксеноперикард	10,06 (9,12-21,38) [*]	64,96 (61,08-67,26)	1,11 (1,02-1,34)
A. mammaria	2,48 (1,36-3,25)	29,72 (23,51-39,62)	2,42 (1,87-3,19)
Аорта крысы	3,51 (3,08-4,29)	326,0 (309,87-359,88) ^{*■}	0,19 (0,17-0,21)

Примечание: * – $p < 0,05$ относительно a.mammaria, # – $p < 0,05$ относительно PCL, ■ – $p < 0,05$ относительно ксеноперикарда, ● – $p < 0,05$ относительно аорты крысы

Оценка ремоделирования сосудистых заплат после имплантации в сосудистую стенку продемонстрировала высокую склонность ксеноперикарда к структурной и кальциевой дегенерации. Образцы, содержащие очаги кальция, наблюдали в группе с ксеноперикардом уже через 1 месяц имплантации, а расслоение заплат – через 3 месяца. Тогда как в группах PCL/VEGF и PCL начало формирования очагов кальцификации отмечали только через 3 месяца, при этом все образцы сохраняли свою целостность на протяжении 12 месяцев. Также, гиперплазию неоинтимы на внутренней поверхности ксеноперикарда отмечали уже через 1 месяц, что не было характерно для синтетических образцов. Формирование эндотелия на заплатах из ксеноперикарда и немодифицированного PCL было слабо выражено на протяжении всего срока исследования, к 12 месяцев наблюдали отдельные эндотелиальные клетки в зоне анастомозов. В свою очередь, на внутренней поверхности образцов PCL/VEGF эндотелиальные клетки появлялись уже через 1 месяц имплантации, а через 12 месяцев они располагались по всей внутренней поверхности. Кроме того, заплаты из ксеноперикарда не подвергались заселению клетками, миграцию клеток внутрь данных образцов отмечали только через месяц имплантации, в более поздние сроки клетки в толще заплат практически отсутствовали. При этом образцы из PCL постепенно равномерно заселялись собственными клетками организма, однако клеточность данных заплат через 12 месяцев имплантации была ниже, чем в PCL/VEGF.

Выводы. Биодegradуемые сосудистые заплаты из PCL с введенным VEGF обладали прочностью, не уступающей данному показателю нативных кровеносных сосудов, а также лучше сохраняли свою целостность при длительной имплантации в стенку сосуда по сравнению с коммерческими заплатами из ксеноперикарда. Вероятно, что высокая пористость материала способствовала его эффективному заселению клетками, а VEGF обеспечивал привлечение эндотелиальных клеток на внутреннюю поверхность и поддержание жизнеспособности клеток в толще заплаты, что, в свою очередь, стимулировало формирование новой сосудистой ткани. Однако сосудистые заплаты также были подвержены кальцификации, но в более отдаленный период.

Заключение. Биодegradуемый материал, полученный методом электроспиннинга, на основе PCL/VEGF имеет значительные перспективы применения в изготовлении сосудистых заплат для каротидной эндартерэктомии, так как он стимулирует формирование элементов кровеносного сосуда и восстановление поврежденной сосудистой стенки. При этом необходима дополнительная модификация заплат, чтобы минимизировать риск кальцификации.

1. Bonati L.H., Dobson J., Featherstone R.L., et al. Long-term outcomes after stenting versus endarterectomy for treatment of symptomatic carotid stenosis: the international carotid stenting study (ICSS) randomised trial // Lancet. 2015. № 385. P. 529–538.

DOI: 10.17223/9785946218412/194

СИНТЕЗ ПОРИСТЫХ НАНОСТРУКТУР γ -AlOOH ОКИСЛЕНИЕМ АЛЮМОНИТРИДНОЙ КОМПОЗИЦИИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ ПОЛИАКРИЛАТА НАТРИЯ

¹Рубцов К.В., ¹Ложкомоев А.С., ¹Хоробрая Е.Г.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Наноструктуры бёмита (γ -AlOOH) привлекают большой интерес, так как они обладают комплексом полезных свойств, таких как биосовместимость, нетоксичность, высокие сорбционные характеристики, положительно заряженная поверхность. Это позволяет использовать такие структуры, например, в биомедицинских приложениях для изготовления антимикробных материалов [1] и систем адресной доставки лекарств [2]. В химической промышленности AlOOH может быть использован как сырьё для производства новых сорбентов и катализаторов на основе оксидов алюминия [3,4]. В этой работе был осуществлен синтез новых иерархических структур в виде пористых частиц бёмита с высокой удельной поверхностью.

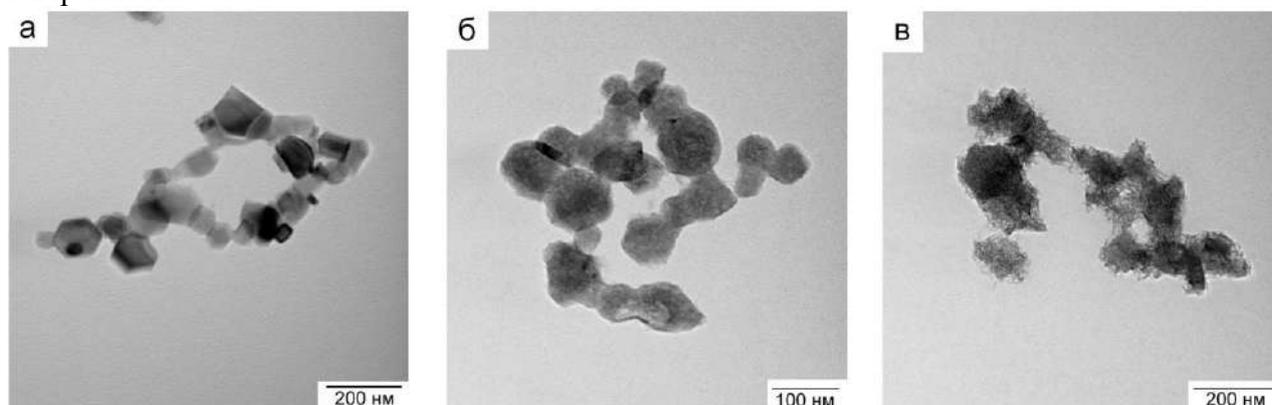


Рис. 1. ПЭМ-изображения исходных частиц (а) и продуктов реакции при различном времени реакции: б – 70 минут, в – 180 минут

Синтез проводили путем окисления нанопорошка алюмонитридной композиции (AlN/Al) при нагревании в водном растворе полиакрилата натрия (PNaA) с концентрацией 0,5 % масс. PNaA был синтезирован радикальной полимеризацией акрилата натрия в растворе с использованием окислительно-восстановительной системы инициирования. Для получения мономера 12,0 г NaOH растворяли в 38 мл дистиллированной воды и по каплям добавляли к 29 г акриловой кислоты в ледяной бане до pH=7,4. Для инициирования полимеризации использовали персульфат аммония ((NH₄)₂S₂O₈) (APS) и пиросульфит калия (K₂S₂O₅) (PDS). 0,5060 г APS и 0,4916 г PDS растворяли в 4 мл воды по отдельности и полученные растворы одновременно добавляли к раствору мономера при перемешивании в стакане при комнатной температуре. После добавления инициаторов вязкость реакционной среды резко увеличивалась, и происходил разогрев реакционной смеси до 60 °С. Полученный раствор PNaA перемешивали в течение 1 часа, после чего полимер сушили при 80 °С в вакууме до постоянной массы и готовили 0,5% раствор PNaA. После этого 0,1670 г композиции, содержащей 70% наночастиц Al и 30% AlN, помещали в раствор, и производили нагрев с 23 до 70 °С со скоростью 1,2 - 1,5 град/мин при перемешивании на магнитной мешалке и выдерживали при 70 °С. Приблизительно через 65 минут после начала нагрева наблюдали выделение водорода.

Для понимания механизма окисления продукты реакции извлекали после 70 минут и после 180 минут от начала нагрева, фильтровали и промывали деионизованной водой 3 раза по 20 мл, оставляя PNaA в фильтрате. Полученные наночастицы сушили в течение 3 часов при 120 °С. Продукты реакции исследовали методом ПЭМ (рис. 1) на микроскопе JEM 2100, JEOL, фазовый состав подтверждали методом РФА. Сферические и гексагональные частицы сохраняют свою форму и размеры на протяжении 180 минут, при этом появляются поры, и

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

значительно увеличивается удельная поверхность, которая у промежуточного продукта составила 61,57 м²/г (рис. 1б), а у конечного продукта (рис. 1в) – 187,30 м²/г. Таким образом, окислением в растворе полимера были получены пористые наноструктуры γ -AlOOH с высокой удельной поверхностью и формой схожей с формой исходных наночастиц прекурсора.

Исследования проведены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Lozhkomoev A., Pervikov A., Bakina O., Kazantsev S. and Gotman I. Synthesis of antimicrobial AlOOH–Ag composite nanostructures by water oxidation of bimetallic Al–Ag nanoparticles // RSC Advances. 2018, 8, 36239-36244.
2. A. H. Munhoz Jr. et al. Use of Pseudoboehmite Nanoparticles for Drug Delivery System of Glucantime® // Journal of Nano Research. 2016. Vol. 38. pp. 47-51.
3. Huimin Z., Yang R., Yong F., Minhua S., Zenghui D., Diyun C., Li'an H., Po-Heng L., Kaimin S., Lingjun K. Solvent-free hydrothermal synthesis of gamma-aluminum oxide nanoparticles with selective adsorption of Congo red // Journal of Colloid and Interface Science. 2019. Vol. 536, pp. 180-188.
4. Hao J.H., Yang W.S., Zhang Z., Pan S. H., Lu B.P., Ke. X., Zhang B. L. and Tang J. L. Hierarchical flower-like Co_{3-x}Fe_xO₄ ferrite hollow spheres: facile synthesis and catalysis in the degradation of methylene blue // Nanoscale. 2013, 5, 3078-3082.

ПЛАСТИЧЕСКИЕ ВРАЩЕНИЯ.

Гриняев Ю.В.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
Томский государственный университет, Томск*

Представляет теоретический и экспериментальный интерес изучение влияния завихренности, как динамической структуры на процесс деформирования твердых тел. Вихревое движение является одним из основных состояний движущихся сред и, как правило, рассматривается в механике жидкостей и газов. Изучение завихренности в твердых телах начинается с работ братьев Коссера [1]. Отличие модели Коссера от классических моделей теории упругости состоит в том, что упругие вращения и упругие смещения являются независимыми переменными. В дальнейшем появляются варианты теории упругости Коссера под различными названиями: ассиметричная упругость, микрополярная эластичность и т.п. [2-5]. Во всех теориях вращения рассматриваются в упругой области. Для реальных материалов эффекты, возникающие в результате упругих вращений, малы по сравнению с эффектами, возникающие в результате упругих смещений.

При пластическом деформировании возникают существенные пластические повороты, возникает фрагментированная структура, когда фрагменты развернуты друг относительно друга. Экспериментальных работ, исследующих явление фрагментации большое количество, например, [6, 7].

Отметим работу [8], в которой рассматривается механизм фрагментации. Рассмотрение ведется в приближении континуума Коссера. Работы, посвященные изучению пластических поворотов, обусловленных дефектами, отсутствуют. Следовательно, исследование пластических поворотов имеет как научное, так и практическое значение. В данной работе впервые рассматриваются пластические повороты, обусловленные дефектами.

В работе [9] была получена система уравнений, описывающая деформацию полукристаллических полимеров. При получении данной системы предполагалось, что полукристаллический полимер состоит из двух фаз: одна фаза кристаллическая, вторая - вязкой жидкости. При таком предположении полукристаллический полимер обладает свойствами твердого тела и свойствами жидкости. Следовательно, из общей системы уравнений для полукристаллического полимера можно выделить уравнения, описывающие деформацию твердого тела. Уравнения для твердого тела имеют следующий вид

$$\nabla \cdot \alpha = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \times \alpha = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial J}{\partial t} - \frac{E}{2S(1+\nu)} \left[(\nabla \bar{u} + \bar{u} \nabla + \beta + \beta^T + \frac{2\nu}{1-2\nu} (\nabla \cdot \bar{u} + Sp\beta) \delta \right] \quad (2)$$

$$\nabla \cdot J = -\frac{c^2 \rho}{S} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{v} \right) \quad (3)$$

$$\nabla \times J = \frac{\partial \alpha}{\partial t} \quad (4)$$

Здесь α, J - тензор плотности и тензор плотности потока дефектов трансляционного типа, β тензор упругой дисторсии от дефектов, \bar{v} скорость упругих смещений, обусловленных потоками дефектов, \bar{u} - вектор упругих смещений от внешних воздействий, ρ плотность, E - модуль Юнга, ν - коэффициент Пуассона, c - скорость и S - константа взаимодействия дефектов, имеющая размерность силы. В работе [9] был предложен эксперимент для определения скорости и константы взаимодействия. Введены следующие обозначения; β^T - транспонированный тензор дисторсии, $Sp\beta$ - сумма диагональных компонент тензора дисторсии, δ - единичный тензор.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Тензор плотности дефектов определяется через пластические дисторсии следующим образом

$$\alpha = -\nabla \times \beta^{pl}, \quad (5)$$

а тензор плотности потока дефектов как

$$J = -\frac{\partial \beta^{pl}}{\partial t}. \quad (6)$$

Подставляя выражения (5) и (9) в систему уравнений (1-4), получим волновые уравнения относительно пластических дисторсий β^{pl} . Выделяя антисимметричную часть тензора пластической дисторсии, которая является пластическим поворотом, получим волновое уравнение относительно пластического поворота. Как и для упругих поворотов [4], получим поперечные и продольные вращательные волны пластичности.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. E. Cosserat and F. Cosserat, *Th'eorie des corps d'eformables* (Librairie Scientifique A. Hermann et fils, Paris 1909). Reprinted by Cornell University Library. English translation by D. H. Delphenich (2007). Available at <http://www.mathematik.tu-darmstadt.de/fbereiche/analysis/pde/staff/neff/patrizio/Cosserat.html>.
2. C. G. Böhmmer and Yu. N. Obukhov, A gauge theoretic approach to elasticity with microrotations, *Proc. R. Soc. A*. 468 (2012), 1391–1407.
3. C. G. Böhmmer, R. Downes, and D. Vassiliev, Rotational Elasticity, *Q. J. Mech. Appl. Math.* 64 (2011), 415–439.
4. C. G. böhmmer and N. tamanini. Rotational elasticity and couplings to linear elasticity october 15, 2013.
5. J. Dyszlewicz, Micropolar theory of elasticity, *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*, v. 15, Springer, Berlin, 2004.
6. Wolf D., Yamakov V., Phillpot S.R., Mukherjee A. , Gleiter H.// *Acta Mater.* 53, 1 (2005).
7. Schiotz E.D., Jacobsen K.W.// *Science* 301, 1357 (2003).
8. И. Э. Келлер, П. В. Трусов. Фрагментация металлов при больших деформациях: один механизм образования пространственно-модулированных вихревых структур. *Прикладная механика и техническая физика*. 2002. Т. 43, N-° 2.
9. Yurii V. Grinyaev, Nadezhda V. Chertova, Evgeny V. Shilko and Sergey G. Psakhie. The Continuum Approach to the Description of Semi-Crystalline Polymers Deformation Regimes: The Role of Dynamic and Translational Defects. *Polymers* **2018**, 10(10), 1155; <https://doi.org/10.3390/polym10101155>

DOI: 10.17223/9785946218412/196

THERMODYNAMIC PARAMETERS OF SHOCK WAVE LOADING OF CARBIDES WITH VARIOUS STOICHIOMETRIC COMPOSITIONS

Maevskii K.K.

Lavrent'ev Institute of Hydrodynamics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk

Shock wave synthesis and compaction using powder mixtures are a promising direction of new materials creation. In this direction intensive research of materials compressibility are carried out to create mixtures with required properties. Mixtures with carbides as a component are of great interest.

The results of numerical experiments on modeling of shock wave loading of solid and porous carbides with various stoichiometric composition are presented. The model is based on the assumption that all the components of the mixture, including gas, have similar pressure, velocity and temperature. Equations of state of Mi-Grüneisen is used for describing behavior of condensed phases. The coefficient of Grüneisen depends explicitly only temperature for model TEC. The modified equation of state is proposed for the calculation of model TEC2 to improve the reliability of the description of thermodynamic parameters of shock-wave loading of pure materials and heterogeneous mixtures of different porosity. The coefficient depends temperature and volume for model TEC2 in this case.

This model allowed to describe behavior of porous materials and mixes in a wide range of porosity and pressures with precision experiment. On the basis of these results, it was proposed to describe this model the behavior of complex materials such as carbides, considering the chemical compound as mixture. Interest in the research on carbides compressibility is related, in particular, to problems of explosive compaction of powders of carbides, i.e. with the microsampl of these compounds with properties (hardness, fragility) of initial grains of specimens. Porous carbide was viewed as porous mixture with the components of the relevant elements of the carbide. Correlation

of volumetric fraction of the condensed component was determined, as well as for solid samples by stoichiometric ratio, but the value decreased proportionally to the porosity of the sample.

Assumption about the possibility of determining the volume of components based on stoichiometric ratio, has allowed not only to describe accurately the behavior of carbides with equal shares of the components such as WC, TiC, TaC, NbC, but also the behavior of boron carbide B₄C.

This material has a high hardness value, yielding to this indicator only diamond that causes the increased interest. The availability of experimental data made it possible to compare the calculated and experimental data, taking into account the assumptions used in the model. For volumetric proportion of boron carbide was determined by a ratio of 4: 1 respectively, chemical composition.

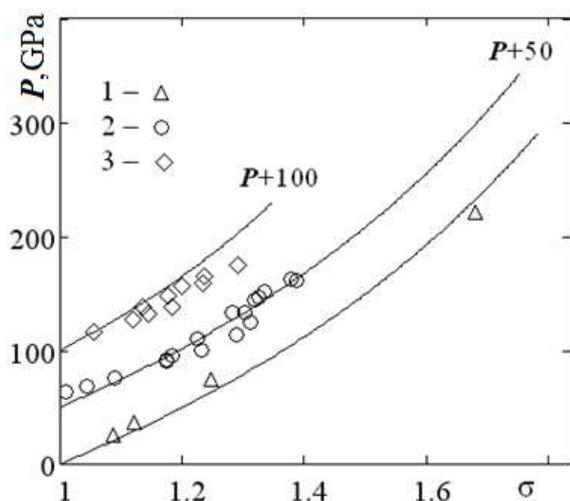


Figure 1. Calculation and experimental data for porous boron carbide in the variables pressure P – compression ratio σ . m 1–1, 2–1.04, 3–1.29 (porosity m is ratio of density of solid substance to the density of sample).

1. Kinelovskii S.A., Maevskii K.K. Model of the behavior of aluminum and aluminum based mixtures under shock wave loading // High Temperature. 2014. V. 52(6). P. 821-829.
2. Kinelovskii S.A., Maevskii K.K. Modeling shock loading of multicomponent materials including bismuth // High Temperature. 2016. V. 54(5). P. 675-681.
3. Kinelovskii S.A., Maevskii K.K. Estimation of the thermodynamic parameters of a shock-wave action on high-porosity heterogeneous materials // Technical Physics. 2016. V. 61(8). P. 1244-1249.
4. Maevskii K.K., Kinelovskii S.A. Thermodynamic parameters of mixtures with silicon nitride under shock-wave impact in terms of equilibrium model // High Temperature. 2018. V. 56(6). P. 853-858.

DOI: 10.17223/9785946218412/197

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ НА СВЕРХПЛАСТИЧНЫЕ СВОЙСТВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА ПТЗВ

Раточка И.В., Лыкова О.Н., Мишин И.П., Найденкин Е.В.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия,
ivr@ispms.tsc.ru*

Известно, что в поликристаллических титановых сплавах с размером зерна менее 10 мкм возможна реализация сверхпластического (СП) течения при температурах, как правило, выше $0,5 T_{пл}$ и скоростях деформации в интервале 10^{-5} - 10^{-3} с⁻¹. В тоже время в титановых сплавах с ультрамелкозернистой (субмикро- и нанокристаллической (СМК и НК)) структурой, полученных методами интенсивной пластической деформации (ИПД), при определенных условиях возможна реализация низкотемпературной и/или высокоскоростной сверхпластичности. Таким образом, характер исходной структуры, а также фазовый состав сплавов могут существенно влиять на особенности развития пластического течения и величину относительного удлинения до разрушения. Большинство исследований, посвященных изучению развития сверхпластической деформации титановых сплавов, проводятся на примере ($\alpha+\beta$) сплавов. В тоже время реализация СП течения в псевдо- α -титановых сплавах может иметь свои особенности. Это должно быть связано, прежде всего, с малой объемной долей второй фазы (до 5%). Как известно, наличие второй фазы обеспечивает стабильность благоприятной для СП деформации структуры и активное развитие фазовых превращений при температурах деформации. Однако в случае сплавов с субмикро- или нанокристаллической структурой, СП деформация реализуется при температурах, существенно ниже температуры полного полиморфного превращения, что должно сводить влияние второй фазы к минимуму. В связи с этим представляет интерес изучение особенностей развития структурно-фазового состояния сплавов в указанных условиях. В тоже время, известных нам работ, в которых проведены такие исследования, достаточно мало. В связи с изложенным выше, исследования реализации эффекта сверхпластичности на примере псевдо- α -титанового сплава в различных структурных состояниях представляются актуальными.

В связи с изложенным выше, в настоящей работе проведено исследование особенностей развития высокотемпературной пластической деформации и эволюции структурно-фазового состояния на примере псевдо α титанового сплава ПТЗВ с различной исходной структурой и низкой объемной долей β фазы. Показано, что в крупнокристаллическом состоянии сверхпластическая деформация в указанном сплаве не реализуется. В тоже время в ультрамелкозернистом (УМЗ) и мелкозернистом состояниях в оптимальных условиях величина деформации до разрушения достигает 600 и 300%, соответственно. При этом наблюдается смещение температурного интервала реализации сверхпластического течения сплава в УМЗ состоянии в область более низких температур примерно на 250 градусов по сравнению с мелкозернистым. Установлено, что немонотонный характер зависимости величины относительного удлинения сплава в УМЗ состоянии от температуры определяется особенностями эволюции его структурно-фазового состояния при СП деформации, обусловленного существенным увеличением размера зерен. Показано, что при сверхпластической деформации наблюдается активное выпадение частиц второй фазы по границам и в объеме зерен. Предполагается, что это связано в первую очередь с интенсификацией зернограницных диффузионных потоков и, как следствие, с перераспределением легирующих примесей в сплаве.

Работа выполнена в рамках Проектов фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2021 годы (III.23.2.2).

DOI: 10.17223/9785946218412/198

**КОНВЕКТИВНЫЙ И ДИФфуЗИОННЫЙ РЕЖИМЫ ТЕЧЕНИЯ
БИОЛОГИЧЕСКОЙ ЖИДКОСТИ ЧЕРЕЗ ПОРИСТУЮ СТЕНКУ ЦИЛИНДРА**

¹Назаренко Н.Н., ^{1,2}Князева А.Г.

¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики прочности и материаловедения*

Сибирского отделения Российской академии наук, Россия, г.Томск

²*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Национальный исследовательский Томский
политехнический университет», Россия, г.Томск
nnelli@ispms.tsc.ru*

Моделирование течения жидкостей в пористых средах имеет многочисленные применения. Задачи теории фильтрации имеют отношение к химической технологии, подземной гидродинамике, переносу вещества в живых системах и др. Значительный интерес представляют задачи, описывающие потоки жидкости в биологических пористых средах. Биологические среды имеют сложную структуру порового пространства. Важной особенностью этих задач является наличие сложных взаимосвязанных явлений разной физической природы, учет которых важен в приложениях к биофизике.

В настоящей работе предложена и исследована модель переноса биологической жидкости в пористом цилиндрическом слое. Математическая постановка включает стационарные уравнение движения и диффузии с начальными и граничными условиями. В модели учитывается сжимаемость и концентрационное расширение. Соответствующие коэффициенты, имеющие термодинамическое определение, отражают реологические свойства и изменение состава в процессе течения. Задача решена численно методом простых итераций. Все численные расчеты проведены для двух режимов течения: конвективного и диффузионного. Показано как влияет учет взаимосвязи полей скорости и концентрации на характеристики течения. Обнаружено, что в конвективном режиме течения скорость линейно увеличивается с увеличением коэффициента концентрационного расширения или с увеличением перепада давления, а в диффузионном режиме изменяется неоднозначно. В конвективном режиме распределение скорости и концентрации различно для связной и несвязной моделей, а в диффузионном режиме распределения концентраций совпадают для любых значений вязкости жидкости. В целом, на распределение скорости и концентрации оказывает влияние вязкость, концентрационное расширение и перепад давления.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/199

ВЛИЯНИЕ НАГРУЗКИ ПРИ ФРИКЦИОННОЙ ОБРАБОТКЕ НА КАЧЕСТВО ПОВЕРХНОСТИ NiCrBSi–Cr₃C₂ ПОКРЫТИЯ, СФОРМИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОЙ НАПЛАВКОЙ

¹Соболева Н.Н., ^{1,2}Макаров А.В., ¹Скорынина П.А., ²Николаева Е.П., ¹Малыгина И.Ю.

¹*Институт машиноведения УрО РАН, Екатеринбург*

²*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург*

В настоящее время в связи с созданием технологичных лазеров нового поколения лазерная наплавка находит всё большее применение, обладая рядом преимуществ перед другими методами нанесения покрытий.

Использование традиционных металлических материалов не всегда позволяет добиться требуемого уровня свойств, в связи с чем всё более актуальным становится получение металлматричных композиционных материалов (МКМ) и покрытий. В МКМ, состоящих из относительно мягкой матрицы и твердых упрочняющих частиц, сочетаются достоинства конструкционных металлических материалов и наполнителя [1].

NiCrBSi сплавы всё чаще используются в качестве материала матрицы для создания МКМ благодаря относительно низкой температуре плавления – это позволяет им выполнять роль пластичной связки для упрочняющих фаз и формировать композиционные покрытия, не допуская при этом расплавления упрочняющих фаз [2]. Композиционные покрытия на основе карбидов хрома широко используются, когда требуется высокая износостойкость и стойкость к высокотемпературной коррозии и окислению. Благодаря способности эффективно сопротивляться высокотемпературному износу, покрытия на основе NiCrBSi с карбидами хрома востребованы в авиационной промышленности [3].

В качестве финишной обработки NiCrBSi покрытий была предложена и применена фрикционная обработка скользящими инденторами, позволяющая формировать градиентные поверхностные слои с нано- и субмикроструктурными структурами и повышенными физико-механическими свойствами на поверхности [4, 5].

В работе исследовано влияние фрикционной обработки на твердость и качество формируемой поверхности композиционного NiCrBSi–Cr₃C₂ покрытия, полученного газопорошковой лазерной наплавкой. Установлено влияние нагрузки на индентор из мелкодисперсного кубического нитрида бора на указанные характеристики. Подбор режима проведения финишной фрикционной обработки позволяет достигнуть упрочнения поверхностного слоя покрытия, а также получить качественные поверхности с низкой шероховатостью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ МК-391.2019.8.

1. Курганова Ю. А., Колмаков. А. Г. Конструкционные металлматричные композиционные материалы: учебное пособие. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2015. 141 с.
2. Yang J., Liu F., Miao X., Yang F. Influence of laser cladding process on the magnetic properties of WC–FeNiCr metal–matrix composite coatings // Journal of Materials Processing Technology. 2012. Vol. 212. P. 1862–1868.
3. Zikin A., Hussainova I., Katsich S., Badisch E., Tomastik C. Advanced chromium carbide-based hardfacings // Surface and Coatings Technology. 2012. Vol. 206. P. 4270–4279.
4. Соболева Н.Н., Макаров А.В., Малыгина И.Ю. Упрочняющая фрикционная обработка NiCrBSi лазерного покрытия // Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты). 2013. № 4. С. 79–85.
5. Макаров А.В., Соболева Н.Н., Саврай Р.А., Малыгина И.Ю. Повышение микромеханических свойств и износостойкости хромоникелевого лазерного покрытия финишной фрикционной обработкой // Вектор науки Тольяттинского государственного университета. 2015. № 4. С. 60–67.

DOI: 10.17223/9785946218412/200

ОСОБЕННОСТИ ВЫСОКОДЕФЕКТНЫХ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ В ПОРОШКАХ МЕТАЛЛОВ ПОСЛЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ

^{1,2}Дитенберг И.А., ^{1,2}Тюменцев А.Н., ³Корчагин М.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

³*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

Проведено обобщение экспериментальных данных об особенностях высокодефектных структурных состояний, формируемых в порошках металлов и их смесях при механической активации в энергонапряженных планетарных шаровых мельницах.

Установлено, что высокодефектные структурные состояния в изучаемых материалах качественно подобны тем, которые наблюдаются в металлах и сплавах разного класса после интенсивного деформационного воздействия методом кручения под давлением.

Во всех изученных в работе материалах в процессе МА формируются структурные состояния двухуровневого типа, которые различаются параметрами зеренно-субзеренной структуры и значениями кривизны кристаллической решетки в зависимости от релаксационной способности и исходной прочности.

Показано, что важным свойством нанообъектов является способность к формированию субструктур с высокими значениями упругой кривизны кристаллической решетки, ее градиентов и градиентов локальных внутренних напряжений при относительно невысоких абсолютных величинах этих напряжений.

Предполагается, что формирование указанных выше структурных состояний является эффективным способом значительного увеличения запасенной энергии деформации и играет важную роль в явлениях аномального массопереноса и механического легирования.

В качестве одного из основных механизмов формирования двухуровневой структуры рассматривается квазивязкий механизм фрагментации и переориентации кристалла потоками неравновесных точечных дефектов в полях градиентов диагональных компонент тензора напряжений.

Использовано оборудование Томского материаловедческого центра коллективного пользования НИ ТГУ. Исследования проведены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23

DOI: 10.17223/9785946218412/201

**ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ МИКРОСТРУКТУРЫ И МИКРОТВЕРДОСТИ
ОБРАЗЦОВ Ni₃Al, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ИСКРОВОГО
ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ, В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРОДОЛЖИТЕЛЬНОСТИ
ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ**

¹Осипов Д.А., ^{1,2}Смирнов И.В., ^{1,2}Гриняев К.В., ¹Мельников В.В.,

³Корчагин М.А., ^{1,2}Дитенберг И.А.

¹*Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

³*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

На сегодняшний день комбинированное использование механической активации с последующим импульсным плазменным спеканием широко применяется при получении сплавов разных систем, в том числе жаропрочных материалов на интерметаллидной основе. Одной из актуальных задач по-прежнему является выявление влияния механической активации на процессы спекания/синтеза.

В настоящей работе проведено изучение влияния продолжительности предварительной механической активации на термическую стабильность микроструктуры и микротвердости образцов Ni₃Al, синтезированных методом искрового плазменного спекания.

Механическая активация смеси порошков 3Ni – Al проведена в энергонапряженных планетарных шаровых мельницах АГО – 2 с водяным охлаждением. Продолжительность обработки составляла 1, 3.5, 5.5 и 10.5 минут. Импульсное плазменное спекание прекурсоров проведено при температуре 1050 °С. Полученные образцы Ni₃Al подвергли часовыми вакуумными отжигами при температурах 1100, 1200 и 1300 °С.

Установлено, что влияние продолжительности предварительной механической активации на микроструктуру и свойства образцов Ni₃Al, синтезированных методом искрового плазменного спекания, сохраняется независимо от режима дальнейшего температурного воздействия.

Выявлено, что повышение температуры отжига сопровождается плавным снижением средних значений микротвердости. При этом увеличение разброса значений микротвердости с ростом температуры отжига образцов с малой продолжительностью предварительной механической активации связано с формированием неоднородной зеренной структуры.

Использовано оборудование Томского материаловедческого центра коллективного пользования ТГУ. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Государственное задание № 3.9586.2017/8.9).

DOI: 10.17223/9785946218412/202

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННЫХ ЗАРЯДОВЫХ ЭФФЕКТОВ В ГЕТЕРОГЕННЫХ МАТЕРИАЛАХ ПОРИСТОГО ТИПА

Алексеев М.В., Воронин Ф.Н., Жуковский М.Е., Савенков Е.Б., Усков Р.В.

ИПМ им М.В.Келдыша РАН, Москва

Исследование функционирования сложных технических объектов в условиях комплексного воздействия ионизирующего излучения является актуальной научно-практической задачей. Решение всей совокупности сложных конструкционных, схемотехнических и технологических задач при разработке, создании и эксплуатации, например, космических средств невозможно без использования математического моделирования комплексных механизмов воздействия излучения на основе фундаментальных математических моделей с прямым учетом микроструктуры материала. Такое моделирование требует полномасштабного применения сверхвысокопроизводительной вычислительной техники и современных технологий распараллеливания MPI, OpenMP, CUDA [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

Суперкомпьютерное моделирование радиационно-индуцированных эффектов (зарядовых, тепловых, токовых) подразумевает прежде всего разработку алгоритмов переноса излучения в гетерогенных материалах. Перенос излучения в гетерогенных пористых материалах сложной геометрической структуры характеризуется тем, что пробеги комптоновских и фотоэлектронов по порядку величины сопоставимы с размерами неоднородностей среды. В этой ситуации требуется детальное моделирование каждого столкновения частиц излучения с атомами среды. Кроме того, необходимо построение геометрической модели вещества с прямым разрешением его микроструктуры.

Разработан комплексный подход к численному моделированию вторичных зарядовых эффектов, генерируемых в гетерогенных материалах пористого типа под воздействием ионизирующего излучения.

Результаты вычислительного эксперимента по расчету зарядовых эффектов во фрагменте пористого материала (рис. 1) показали, что при облучении исследуемого фрагмента формируются зарядовые поля с резко неоднородной пространственной структурой.

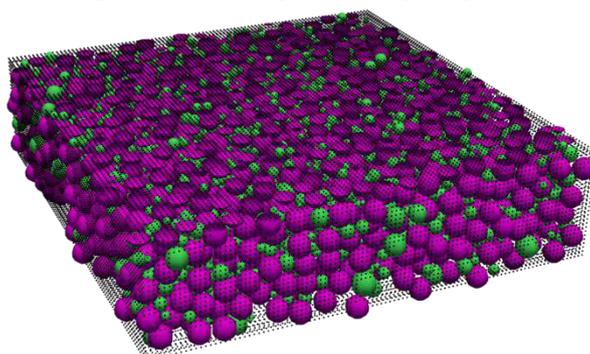


Рис. 1 – Фрагмент пористого материала, пурпурным цветом закрашены поры, зеленым – детекторы регистрирующей системы

Применение разработанных программных средств представлено в виде результатов, полученных на гетерогенном вычислительном кластере ГВК К-100 в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, проект № 17-71-30014.

1. Жуковский М.Е., Усков Р.В., Гибридное распараллеливание алгоритмов моделирования каскадных процессов переноса излучения // Матем. моделирование, 27:5 (2015), с.39-51 <http://mi.mathnet.ru/mm3598>.

DOI: 10.17223/9785946218412/203

СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТЬ И ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В ВЫСОКОНИКЕЛЕВЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ Ti-51.7Ni ПОСЛЕ СТУПЕНЧАТОГО СТАРЕНИЯ

¹Тимофеева Е.Е., ¹Пичкалева М.В., ¹Суриков Н.Ю., ¹Тагильцев А.И., ¹Ефтифеева А.С.,
¹Панченко Е.Ю., ¹Чумляков Ю.И.

¹Томский государственный университет, Томск

Работа посвящена исследованию закономерностей изменения критических напряжений образования мартенсита, кривых $\sigma(\epsilon)$ и $\epsilon(T)$, интервала развития сверхэластичности (СЭ), величины механического гистерезиса, прочностных свойств высокотемпературной В2-фазы при деформации сжатием в [001]-монокристаллах Ti-51.7ат.% Ni в зависимости от режима термической обработки. Монокристаллы исследовали после следующих термических обработок: 1) отжиг 1253 К, 1 ч, закалка в воду (закаленное состояние); 2) старение при 823 К, 1 ч, закалка в воду (старение 823 К); 3) старение при 823 К, 1 ч + старение при 673 К, 1 ч, закалка в воду (старение 823 К + 673 К).

В закаленных монокристаллах из-за пересыщения по никелю при охлаждении/нагреве в свободном состоянии вместо термоупругого МП наблюдается переход в strain glass мартенсит [1, 2]. В матрице присутствуют многочисленные точечные дефекты, которые формируют локальные деформации, нарушают дальний порядок в кристалле и препятствуют появлению ламелей мартенсита. Вместо МП при охлаждении происходит переход из состояния динамически-разупорядоченных нанодоменов (unfrozen strain-glass) в состояние упорядоченных локальных нанодоменов (frozen strain-glass). Под нагрузкой возможно наблюдать МП в В19'-мартенсит [2]. Эффект СЭ наблюдается только при низких температурах до 250 К и высоких критических напряжениях 1200 МПа. Старение при 823 К, 1 ч приводит к выделению крупных частиц Ti_3Ni_4 ($d \sim 400$ нм), которые способствуют снижению никеля в матрице, появлению термоупругих В2-R-В19' МП при охлаждении/нагреве и уменьшению минимальных критических напряжений, необходимых для образования мартенсита в 8 раз до 150 МПа. Наряду с высокими прочностными свойствами В2-фазы (2065 МПа) это способствует развитию СЭ от 223 К до 473 К, что является самым широким интервалом среди сплавов TiNi [3]. После высокотемпературного старения при 823 К дополнительно проводилось низкотемпературное старение при 673 К, в ходе которого выделяются наноразмерные частицы Ti_3Ni_4 ($d < 30$ нм). Таким образом, ступенчатое старение 823 К + 673 К приводит к формированию бимодальной структуры с различным размером частиц, где мелкие частицы в локальных областях могут располагаться ориентированно вследствие действия полей напряжений от крупных частиц. Предполагается, что механизм развития МП в данной структуре следующий. Сначала кристаллы мартенсита появляются в областях, где сопротивление зарождению и росту мартенсита минимально – на границах крупных частиц Ti_3Ni_4 и в областях, где мелкие частицы Ti_3Ni_4 расположены ориентированно, а затем МП проходит в пространствах между крупными частицами, где мелкие частицы расположены разориентированно и сопротивление движению межфазных и двойниковых границ максимально. Вследствие этого минимальные напряжения, необходимые, чтобы индуцировать МП под нагрузкой, дополнительно понижаются в 2 раза, до 75 МПа, по сравнению со старением при 823 К. Повышаются прочностные свойства В2-фазы до 2385 МПа. В итоге, СЭ наблюдаются в широком интервале температур от 282 К до 460 К с полностью обратимой деформацией и узким механическим гистерезисом 30 МПа.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 18-19-00298.

1. Ren X. Strain glass and ferroic glass – Unusual properties from glassy nano-domains Phys // Status Solidi B. 2014. V. 251(10). P. 1982–1992.
2. Wang Y., Ren X., Otsuka K. Strain glass: glassy martensite // Materials Science Forum. 2008. V. 583. P. 67-84.
3. Kaya I., Karaca H.E., Souri M., Chumlyakov Y., Kurkcu H. Effects of orientation on the shape memory behavior of $Ni_{51}Ti_{49}$ single crystals // Materials Science & Engineering A. 2017. V. 686. P. 73–81.

DOI: 10.17223/9785946218412/204

НАНОЛАМИНАТ СИСТЕМЫ Cu-Al, ПОЛУЧЕННЫЙ ПУТЕМ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ С ПОСЛЕДУЮЩИМ КРУЧЕНИЕМ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

^{1,2}Гриняев К.В., ^{1,2}Смирнов И.В., ³Корчагин А.Н., ^{1,2}Дитенберг И.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

³*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

Многослойные металлические композиты представляют большой интерес, как с точки зрения формирования уникальных наноструктурных состояний, так и комплекса приобретаемых физико-механических свойств. На сегодняшний день продемонстрирована возможность получения многослойных наноламинатов на разнообразных металлических системах, исходные компоненты которых могут существенно различаться прочностными характеристиками, взаимной растворимостью, температурами плавления и химическим сродством.

Для получения многослойных нанокомпозитов применяются как способы осаждения, так и методы, базирующиеся на реализации больших степеней пластической деформации. Среди последних наиболее часто используются многократная пакетная прокатка в вакууме, механическая активация с последующей консолидацией прокаткой или кручением под давлением

В настоящей работе представлены результаты исследования особенностей микроструктуры и микротвердости наноламната системы Cu-Al, полученного путем механической активации порошковой смеси с последующей консолидацией методом кручения под давлением.

После механической активации размер порошинок в смеси находится в диапазоне от субмикронных до 200 мкм. Среднее значение микротвердости составляет 3 ГПа.

Деформация кручением под давлением приводит к формированию наноламната, микроструктура которого представлена чередующимися полосами Cu и Al, а также полосами или частицами интерметаллических соединений (преимущественно Al₂Cu). Ширина полос, разделенных как межфазными, так и межзеренными границами составляет, как правило, от 10 до 100 нм.

Показано, что формирование чередующихся нанослоёв меди и алюминия обеспечивает повышение микротвердости до 4 – 5 ГПа.

Исследования проведены с использованием оборудования Томского материаловедческого центра коллективного пользования НИ ТГУ. Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23

DOI: 10.17223/9785946218412/205

**ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СВЕРХЭЛАСТИЧНОСТЬ В ГЕТЕРОФАЗНЫХ
МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $\text{Ni}_{49}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$ (АТ. %)**

Ларченкова Н.Г., Панченко Е.Ю., Тохметова А.Б., Чумляков Ю.И.

Томский государственный университет, Томск

В настоящей работе представлены исследования высокотемпературной сверхэластичности (СЭ) на гетерофазных монокристаллах сплава $\text{Ni}_{49}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$ (ат.%). Благодаря проявлению термоупругих МП под нагрузкой в широком интервале температур, включая высокотемпературную СЭ, возможно создавать детали элементов, способных изменять и восстанавливать свою форму при приложении напряжений и снятии нагрузки, как при низких, так и при высоких температурах [1, 2]. Для эксплуатации таких элементов необходимо, чтобы материал обладал высокой прочностью и циклической стабильностью функциональных свойств. Как показано в работах [3, 4] однофазные и гетерофазные [001]-монокристаллы $\text{NiFeGa}(\text{Co})$ обладают высокой циклической стабильностью функциональных свойств при исследовании эффекта СЭ и высокими прочностными свойствами аустенитной и мартенситной фазы. Однако, ранее систематических исследований влияния кристаллической структуры высокотемпературной фазы и размеров дисперсных частиц вторичных фаз на высокотемпературную СЭ в гетерофазных монокристаллах $\text{NiFeGa}(\text{Co})$ проведено не было. Поэтому, целью данной работы является исследование высокотемпературной СЭ с различной микроструктурой в [001]-монокристаллах сплава $\text{Ni}_{49}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$ при сжатии.

Монокристаллы $\text{Ni}_{49}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_6$ выращены методом Бриджмена. Образцы из монокристаллов вырезаны с помощью электроискровой резки размером $3 \times 3 \times 6$ мм³. Для исследования выбраны два режима термической обработки: отжиг при $T = 1373$ К, 25 мин. с последующей закалкой в воду – TO_1 ; отжиг при $T = 1373$ К, 25 мин. (закалка) + старение при $T = 673$ К, 4 ч – TO_2 . После TO_1 выделяются частицы γ -фазы размером до $d = 60$ мкм с объемной долей 7 % и при охлаждении/нагреве монокристаллы испытывают переход из В2 аустенита в тетрагональный $L1_0$ -мартенсит. Последующее старение (TO_2) приводит, к упорядочению высокотемпературной фазы, формированию $L2_1$ -структуры, выделению наноразмерных частиц γ' -фазы до $d = 15$ нм с объемной долей 4 % и смене последовательности МП. $L2_1$ -аустенит в кристаллах после TO_2 переходит в $L1_0$ -мартенсит через модулированные $10\text{M}/14\text{M}$ структуры.

На рисунке 1 а, б представлен температурный интервал СЭ, полученный в [001]-кристаллах после TO_1 и TO_2 . Показано, что монокристаллы как после TO_1 , так и TO_2 демонстрируют высокотемпературную СЭ в широком температурном интервале $\Delta T = T_{\text{СЭ}2} - T_{\text{СЭ}1}$ равном 250 К и 262 К, соответственно. Температура начала интервала СЭ $T_{\text{СЭ}1} > A_f$, при данной температуре мартенсит напряжений является термодинамически нестабильным и критические напряжения образования мартенсита больше величины механического гистерезиса $\sigma_{\text{кр}} > \Delta\sigma$. $T_{\text{СЭ}2}$ – температура конца интервала СЭ, при которой наблюдается первая петля обладающая необратимой деформацией $\varepsilon_{\text{необр}} > 0,5$ %. В исследованных кристаллах $\varepsilon_{\text{необр}}$ при проявлении СЭ появляется только при $T_{\text{исп}} > 553$ К и достижении деформирующих напряжений 900-1000 МПа.

Показано, что с ростом температуры испытания вид кривых $\sigma(\varepsilon)$ после TO_1 и TO_2 изменяется: увеличиваются $\sigma_{\text{кр}}$, $\Delta\sigma$ и $\theta = d\sigma/d\varepsilon$ и уменьшается обратимая деформация $\varepsilon_{\text{обр}}$. Зависимость величины обратимой деформации $\varepsilon_{\text{обр}}$ в [001]-кристаллах от уровня критических напряжений образования мартенсита обусловлена вкладом упругой деформации, возникающей из-за различия упругих модулей аустенита E_A и мартенсита E_M [5]. Смена последовательности МП после TO_2 приводит к тому, что наблюдается более узкий $\Delta\sigma$ на всем интервале температур по сравнению с TO_1 . Поскольку в кристаллах после TO_2 МП может идти через промежуточный 14M -мартенсит, который обладает лучшей совместностью с аустенитом, меньшими $\sigma_{\text{кр}}$ и меньшей величиной рассеяния энергии при движении межфазной границы.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Для выяснения стабильности микроструктуры монокристаллов после высокотемпературных испытаний в исследуемых кристаллах снова прописали кривые $\sigma(\epsilon)$ при $T \approx T_{C\epsilon 1}$ (см. рис. 2 а, б). Экспериментально показано, что после TO_1 $\sigma_{кр}$ увеличились, а после TO_2 уменьшились в 2 раза. Возможной причиной увеличения $\sigma_{кр}$ в кристаллах с TO_1 является стабилизация высокотемпературной фазы за счёт выделения наноразмерных частиц в процессе механических испытаний, что приводит к понижению температур МП на 32 К, как и показано на калориметрических кривых (см. рис. 2 б, в – красные кривые). В кристаллах с TO_2 снижение температур МП незначительное на 11 К (см. рис. 2 б, в – черные кривые). Уменьшение $\sigma_{кр}$ обусловлено появлением остаточного мартенсита, способствующего более легкому зарождению мартенсита напряжений при последующих циклах нагрузка/разгрузка (см. рис. 2 б).

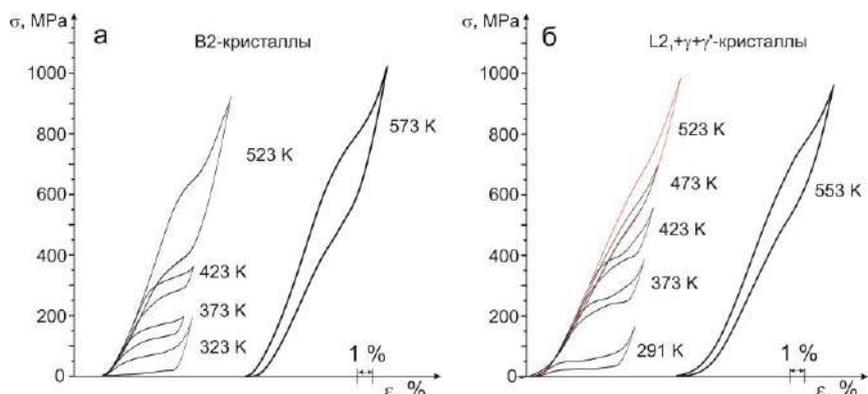


Рис. 1. Кривые $\sigma(\epsilon)$ в монокристаллах сплава $Ni_{49}Fe_{19}Ga_{27}Co_6$ после а) TO_1 и б) TO_2

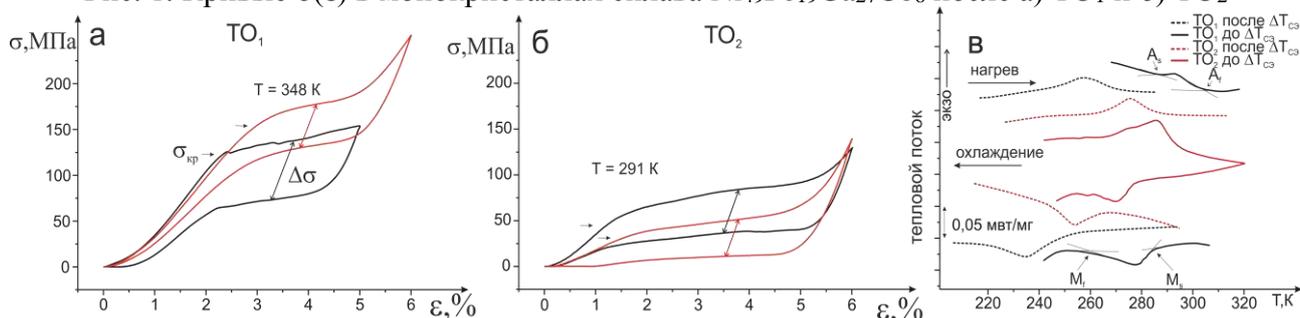


Рис. 2. Кривые $\epsilon(T)$ прописанные при $T = T_{C\epsilon 1}$ в начале температурного интервала (красная кривая) и в конце температурного интервала (черная кривая) после а) TO_1 ; б) TO_2 ; в) калориметрические кривые, полученные при охлаждении и нагреве

Таким образом, экспериментально показано, что закалённые и состаренные [001]-кристаллы $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ проявляют высокотемпературную СЭ в широком интервале температур и напряжений. В состаренном состоянии кристаллы характеризуется более узким механическим гистерезисом $\Delta\sigma$, и более высокой стабильностью при высокотемпературных испытаниях по сравнению с закаленным состоянием.

Работа выполнена в рамках Программы «Научный фонд им. Д.И. Менделеева Томского государственного университета».

1. Ветошкина Н.Г., и др. Влияние старения на микроструктуру, эффект памяти формы и сверхэластичность в монокристаллах $NiFeGaCo$ ориентированных вдоль [001]-направления // Известие высших учебных заведений. Физика. 2016. Т. 59. № 7/2. С. 28–33.
2. Jaronie M. J., et. al. Review of shape memory alloy research, applications and opportunities // Materials and Design. 2014.V. 56 P. 1078–1113.
3. Efstathiou C., et. al. Fatigue response of $NiFeGa$ single crystals // Scr. Mat. 57 (2007) 409–412.
4. Larchenkova, et. al. N. G. Cyclic stability of superelasticity in [001]-oriented stress-free and stress-assisted aged $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ single crystals // AIP Conf. Proceedings 2051, 020166 (2018).
5. Тимофеева Е. Е. Закономерности термоупругих мартенситных превращений, эффекта памяти формы и СЭ в монокристаллах ферромагнитных сплавов Ni-Fe-Ga-(Co): автореферат диссертации на соискание уч. ст. канд. физ.-мат. наук: 01.04.07. /Тимофеева. – Томск, 20.12.2012г. – 195.

DOI: 10.17223/9785946218412/206

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ СТАРЕНИЯ В МАРТЕНСИТЕ ПОД НАГРУЗКОЙ НА ДВУСТОРОННИЙ ЭФФЕКТ ПАМЯТИ ФОРМЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ (ат. %)

Тохметова А.Б., Ларченкова Н.Г., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Ферромагнитные сплавы Гейслера на основе $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ испытывают мартенситные превращения (МП) за счет изменения температуры, под действием нагрузки и/или магнитного поля. Сплавы обладают такими функциональными свойствами как эффект памяти формы (ЭПФ) и эффект сверхэластичности, где наблюдаются большие обратимые деформации до 6,25 % при сжатии и до 13,0 % при растяжении [1]. Для упрощения конструкций механизмов, действие которых основано на ЭПФ, в материале создают внутренние дальнедействующие поля напряжений, которые приводят к наблюдению двустороннего эффекта памяти формы (ДЭПФ). В этом случае изменение размеров образца происходит только за счет изменения температуры без внешних приложенных напряжений. Одним из способов наведения ДЭПФ в сплавах является такая термомеханическая обработка как старение в мартенситном состоянии под сжимающей нагрузкой (СМН), основанное на эффекте стабилизации мартенсита. Эффективность данного эффекта показана в работах [2] на кристаллах ферромагнитного сплава $CoNiGa$. На сплавах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ систематических исследований влияния СМН ранее изучено не было, поэтому целью работы является влияние режимов СМН на проявление ДЭПФ.

Для исследования выбраны монокристаллы сплава $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ после высокотемпературного отжига от $T = 1448$ К, 1 час с закалкой в воду. Высокотемпературный отжиг приводит к однородной структуре материала, высокотемпературная фаза в закаленных монокристаллах имеет B2-структуру и при изменении температуры и/или внешних напряжений переходит в низкотемпературный $L1_0$ -мартенсит. Ориентация внешней нагрузки при проведении старения в мартенсите выбрана вдоль $[110]$ -направления, а ДЭПФ исследовали вдоль перпендикулярного – $[001]$ -направления. Предполагалось, что за счет старения в мартенсите вдоль $[110]$ -направления возможно стабилизировать раздвойникованный вариант мартенсита, приводящий к растягивающей деформации вдоль $[001]$ -направления, теоретический ресурс которой составляет $\epsilon_0 = 13,0$ % с учетом образования сдвойникового варианта мартенсита и последующего раздвойникового кристаллов мартенсита ($\epsilon_{tr} = \epsilon_{CVP} + \epsilon_{detw}$). Таким образом, после старения в мартенсите следует ожидать большие обратимые деформации до 13,0 % при реализации ДЭПФ.

Стабилизация ориентированного варианта мартенсита при СМН наблюдается за счет перераспределения точечных дефектов и атомов разного сорта в соответствии с симметрией кристалла мартенсита, и способствуют формированию необходимых условий для роста ориентированного варианта мартенсита при охлаждении без внешних приложенных напряжений [3]. Для проведения СМН выбран следующий режим: при $T_{СМН} = 373$ К нагружали образец до тех пор, пока он не перейдет из B2-фазы в $L1_0$ -фазу и затем после 1 часа выдержки разгружали. В ходе эксперимента выяснено, что необходимым условием для наблюдения ДЭПФ после СМН является то, что напряжение старения должно быть выше уровня критических напряжений образования мартенсита, т. е. $\sigma_{ст} > \sigma_{кр}$.

Экспериментально показано, что после СМН при $T_{СМН} = 373$ К значение растягивающего ДЭПФ достигает 7,0 %, что составляет $0,52\epsilon_0$ вдоль $[001]$ -направления. Такое различие деформаций может быть связано со стабилизацией нескольких вариантов мартенсита и/или сдвойникового варианта мартенсита. Деформация образца при проявлении ДЭПФ в термоциклах происходит в температурных интервалах прямого $\Delta_1 = 16$ К и обратного $\Delta_2 = 13$ К МП, где $\Delta_1 = M_s - M_f$, $\Delta_2 = A_f - A_s$.

Повышение эффективности диффузионных процессов, что является основным механизмом стабилизации мартенсита при старении, возможно посредством увеличения

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

температуры испытания, приложенного напряжения и времени выдержки. При повышении температуры старения в мартенсите до $T_{СМН2} = 423$ К величина обратимой деформации ДЭПФ вдоль [001]-направления увеличивается до 9,0 % и составляет $0,67\varepsilon_0$. Прямое и обратное МП развивается в узких интервалах температур $\Delta_1 = \Delta_2 \rightarrow 0$. Термический гистерезис не зависит от режима СМН и составляет среднее значение порядка ≈ 50 К.

После СМН при $T_{СМН1} = 373$ К под действием внешних сжимающих напряжений величиной $|\sigma| \approx 8,5$ МПа, которые противодействуют растяжению образца при проявлении ДЭПФ в циклах охлаждение/нагрев, обратимая деформация становится равной 0. Это говорит о том, что приложенные сжимающие напряжения становятся сравнимы с внутренними растягивающими. После СМН при $T_{СМН2} = 423$ К значение противодействующих напряжений достигает до 37,5 МПа. Используя значения противодействующих напряжений σ и величину обратимой деформации ε при данных напряжениях можно оценить работу выхода на единицу массы образца, которую способен совершить материал при проявлении ДЭПФ. После СМН при $T_{СМН1} = 373$ К кристаллы обеспечивают работу выхода величиной $W = 0,004$ Дж/г. Тогда как после СМН при $T_{СМН2} = 423$ К кристаллы демонстрируют более высокое значение $W = 0,12$ Дж/г. Это значение сравнимо с работой выхода для высокотемпературных кристаллов $Ni_{24.5}Ti_{50.5}Pd_{25}$ [4], однако ниже, чем в состаренных под нагрузкой в мартенсите монокристаллах $Co_{35}Ni_{35}Al_{30}$, где $W = 0,19$ Дж/г [5].

Таким образом, повышение температуры старения в мартенсите приводит к увеличению обратимой деформации при ДЭПФ от 7,0 % до 9,0 %, к уменьшению температурных интервалов развития МП от 13 – 16 К до ≈ 0 К, к сдвигу температур начала и конца прямого и обратного МП в область высоких температур на 54 К и к увеличению работы выхода от 0,004 Дж/г до 0,12 Дж/г.

1. Термоупругие мартенситные превращения в монокристаллах, содержащих дисперсные частицы / Ю.И. Чумляков [и др.] // Изв. вузов. Физика. 2011. Т. 54. № 8. С. 96–108.
2. Martensite aging – avenue to new high temperature shape memory alloys / T. Niendorf [et al.] // Acta Mater. 2015. V. 89. P. 298–304.
3. Otsuka K. Mechanism of martensite aging effects and new aspects / K. Otsuka, X. Ren // Mater. Sci. Eng., A. 2001. V. 312. P. 207–218.
4. Work production using the two-way shape memory effect in NiTi and a Ni-rich NiTiHf high-temperature shape memory alloy / K.C. Atli [et al.] // Smart Mater. Struct. 2015. V. 24. P. 125023–1–125023–12.
5. Two-way shape memory effect in ferromagnetic $Co_{35}Ni_{35}Al_{30}$ single crystals aged under stress / E. Panchenko [et al.] // Scr. Mater. 2014. V. 10. P. 90–91.

DOI: 10.17223/9785946218412/207

ОРИЕНТАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕРМИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА ПРИ РАЗВИТИИ R-B19' МП В СОСТАРЕННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА Ni_{50,6}Ti_{49,4}

Суриков Н.Ю., Тимофеева Е.Е., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.

Томский государственный университет, Томск

Работа посвящена выяснению влияния ориентации и морфологии R-мартенсита на закономерности развития B2–R и R–B19' мартенситных превращений (МП) под сжимающей нагрузкой: величину термического гистерезиса и стадийность МП при проявлении эффекта памяти формы (ЭПФ) в состаренных монокристаллах сплава Ni_{50,6}Ti_{49,4} (ат. %).

Термическая обработка – отжиг 1253 К, 1 ч + старение 573 К, 1,5 ч выбрана, исходя из следующих соображений. Во-первых, данная обработка приводит к получению широкого температурного интервала, в котором материал находится в R-фазе. Это позволит более подробно изучить зависимость термического гистерезиса при развитии B2-R-B19' МП от ориентации и морфологии R-мартенсита. Во-вторых, выбранный режим старения обеспечивает выделение когерентных наноразмерных частиц Ti₃Ni₄ (< 10 нм), упрочняющих B2-фазу и расширяющих температурный интервал сверхэластичности (СЭ) [1, 2].

В рамках исследования выбраны монокристаллы, ориентированные вдоль [001]- и [112]-направлений. В [001]-монокристаллах при сжатии деформация B2–R МП равна нулю, фактор Шмида для действующих систем скольжения $a\langle 100 \rangle \{011\}$ в аустените равен нулю. Таким образом, данная ориентация является высокопрочной и при развитии B2–R–B19' МП под нагрузкой стадий B2-R наблюдаться не должно. Что касается низкопрочной [112]-ориентации, то деформация решетки при B2–R МП составляет 0,2 %, а фактор Шмида для скольжения в аустените составляет 0,47 и близок к максимальному значению [3]. Выбор ориентаций с различной деформацией B2–R МП позволит исследовать влияние морфологии R-мартенсита (самоакомодирующая структура, ориентированный мартенсит) на закономерности развития B2–R и R-B19' МП.

Электронно-микроскопические исследования микроструктуры состаренных монокристаллов подтверждают наличие дисперсных частиц Ti₃Ni₄ размером < 10 нм, а также, совместно с данными дифференциальной сканирующей калориметрии, существование R-мартенсита в широком температурном интервале (182 – 273 К) [4].

В [001]-ориентации в циклах охлаждение/нагрев при постоянной нагрузке на кривых $\epsilon(T)$ МП идет в одну стадию с максимальной величиной ЭПФ до 3 % и практически без необратимой деформации при напряжениях до 600 МПа (рис 1, а). Стадий, связанных с B2–R МП под нагрузкой, не наблюдается. При напряжениях до 300 МПа реализуется R-B19' МП, термический гистерезис при этом уменьшается в ~ 3,5 раза с 65 до 20 К. При напряжениях, выше 300 МПа, реализуется последовательность B2-B19' МП, и термический гистерезис практически не зависит от напряжений (рис. 1, б).

Зависимость термического гистерезиса от уровня приложенных напряжений в [001]-монокристаллах можно объяснить следующими факторами.

Во-первых, высокая прочность B2-фазы [001]-монокристаллов обеспечивает развитие МП при высоких напряжениях и температурах без пластической деформации. Во-вторых, при сжатии вдоль [001]-направления не наблюдается раздвойникового B19'-мартенсита, и плоскость габитуса остается неискаженной вне зависимости от уровня внешних напряжений. В-третьих, с ростом температуры ромбоэдрический угол решетки R-мартенсита приближается к 90° [5]. Поскольку частицы Ti₃Ni₄ выросли в B2-фазе, то при B2–R МП изменение ромбоэдричности R-мартенсита охлаждения приводит к изменению параметра размерного несоответствия между решетками R-мартенсита и частиц Ti₃Ni₄. С увеличением температуры несоответствие уменьшается, параметры решетки R-фазы приближаются к B2-фазе, и сила сопротивления движению межфазной границы и энергия рассеяния снижаются.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

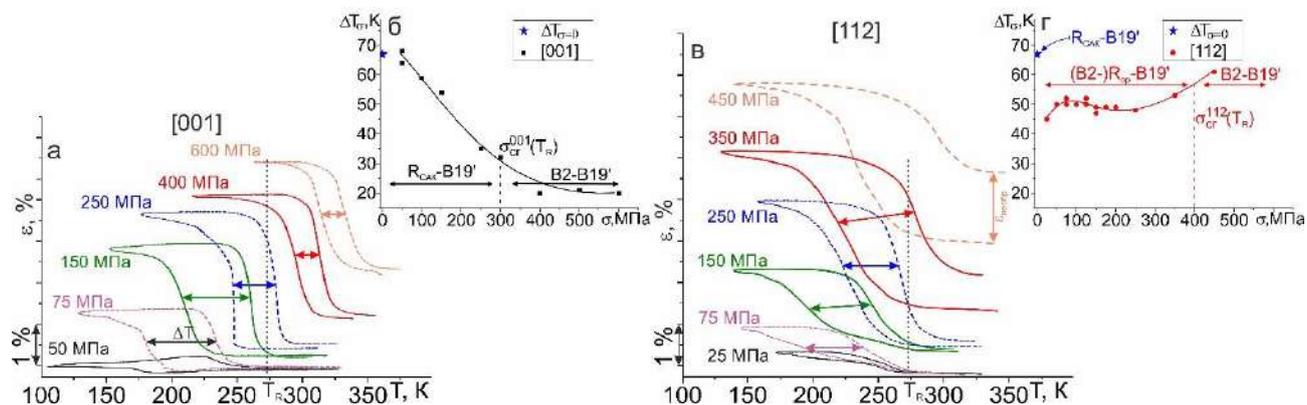


Рис. 1. Кривые $\varepsilon(T)$ и соответствующие зависимости термического гистерезиса от уровня приложенных напряжений [001]- (а, б) и [112]- (в, г) монокристаллов сплава $Ni_{50.6}Ti_{49.4}$

В [112]-ориентации максимальная величина ЭПФ близка к [001]-монокристаллам и составляет 3,2 %. При напряжениях ниже 400 МПа деформация полностью обратима, и на кривых $\varepsilon(T)$ присутствуют стадии, как связанная с ориентированным ростом R-мартенсита при T_R , так и с R-B19' МП (рис. 1, в). При 400 МПа и выше наблюдаются одностадийные B2-B19' МП под нагрузкой, появляется необратимая деформация, величина которой достигает 1,5 % при 600 МПа. При полностью обратимом МП термический гистерезис, связанный с образованием B19'-мартенсита, слабо зависит от уровня приложенных напряжений и уменьшается с 52 до 47 К. При высоких напряжениях, когда появляется необратимость, гистерезис увеличивается до 61 К (рис. 1, г).

Причины различия зависимости термического гистерезиса в исследуемых ориентациях следующие. Во-первых, в [112]-монокристаллах при малых напряжениях ($\sigma \leq 75$ МПа) термический гистерезис в $\sim 1,5$ раза меньше, чем в свободном состоянии $\Delta T = 67$ К. Это связано с различной морфологией R-мартенсита при развитии R-B19' МП: самоаккомодирующая структура в свободном состоянии, и ориентированный вариант при охлаждении под нагрузкой. Уменьшение числа двойниковых границ в R-мартенсита приводит к уменьшению диссипации энергии при R-B19' МП.

Во-вторых, несмотря на изменение угла α в решетке R-мартенсита, низкие прочностные свойства B2-фазы в [112]-монокристаллах приводят к возникновению микропластической деформации в ходе развития МП. Поэтому термический гистерезис при R-B19' МП под нагрузкой изменяется слабо с ростом напряжений, а при B2-B19' МП и напряжениях выше 350 МПа гистерезис возрастает.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-19-00298.

1. I. Kaya, H. Tobe et al. Shape memory behavior of [111]-oriented NiTi single crystals after stress-assisted aging // *Acta Metall. Sin. (Engl. Lett.)*. – 2016. – V. 29(3). – P. 282–286
2. J.I. Kim, S. Miyazaki. Effect of nano-scaled precipitates on shape memory behavior of Ti-50.9at.%Ni alloy // *Acta Materialia*. – 2005. – V. 53 – P. 4545–4554
3. Xiangyang Zhang, Huseyin Sehitoglu. Crystallography of the B2→R→B19 phase transformations in NiTi. // *Materials Science and Engineering A*. – 2004. – V. 374. – P. 292–302
4. E. E. Timofeeva, E. Yu. Panchenko, N. Yu. Surikov et al. Special features of thermal and stress hysteresis of B2–R–B19' martensitic transformations in aged [001]-oriented Ti–50.6 at.% Ni single crystals // *Russian Physics Journal*. – 2019. – V. 61. – No. 12. – P. 2231–2235
5. Miyazaki, S. Kimura, and K. Otsuka. Shape-memory effect and pseudoelasticity associated with the R-phase transition in Ti-50.5 at.% Ni single crystals // *Philos. Mag. A*. – 1988. – V. 57. – P. 467–478

DOI: 10.17223/9785946218412/208

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЦИТОТОКСИЧНОСТИ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ГИДРОГЕЛЯ ПОЛИАКРИЛАТА НАТРИЯ И γ -АlOOH

¹Рубцов К.В., ¹Кондранова А.М., ¹Фоменко А.Н., ¹Бакина О.В., ¹Ложкомоев А.С.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Разработка новых гидрогелей и способов их синтеза является актуальной задачей, поскольку они широко используются биотехнологии и медицине благодаря их биосовместимости, гемостатическим свойствам, эластичности и нетоксичности. Гидрогели находят широкое применение для создания основ ранозаживляющих повязок, систем адресной доставки лекарств, умных полимерных систем [1-3].

Перспективным видом гидрогелей являются физические гидрогели, в которых пространственная сетка между макромолекулами образуется без образования химической связи, а сшивка может происходить за счет ионных взаимодействий, водородных связей, кристаллизации. Преимуществом таких гидрогелевых систем является их способность к самовосстановлению структуры после механических повреждений и отсутствие необходимости использования сшивающих агентов при их получении. В этой работе был разработан простой способ синтеза композитов *in situ* на основе физического гидрогеля из полиакрилата натрия (PNaA), сшитого ионами алюминия, и наноструктур бемита (γ -AlOOH) в качестве перспективного гемостатического и ранозаживляющего средства.

Бемит получали по методике, описанной в работе [4]. PNaA синтезировали радикальной полимеризацией акрилата натрия в воде при pH=7.4. Для полимеризации использовали окислительно-восстановительную систему инициирования, добавляя к раствору мономера персульфат аммония ((NH₄)₂S₂O₈) и пиросульфит калия (K₂S₂O₅). Для получения композита 15 г 33% водного раствора PNaA смешивали с 0,25 г наночастиц Al и 0,5 г AlOOH и нагревали до 80 °С при постоянном перемешивании. Через час извлекали полученный композит, представляющий из себя набухший гидрогель с распределенным по объему γ -AlOOH.

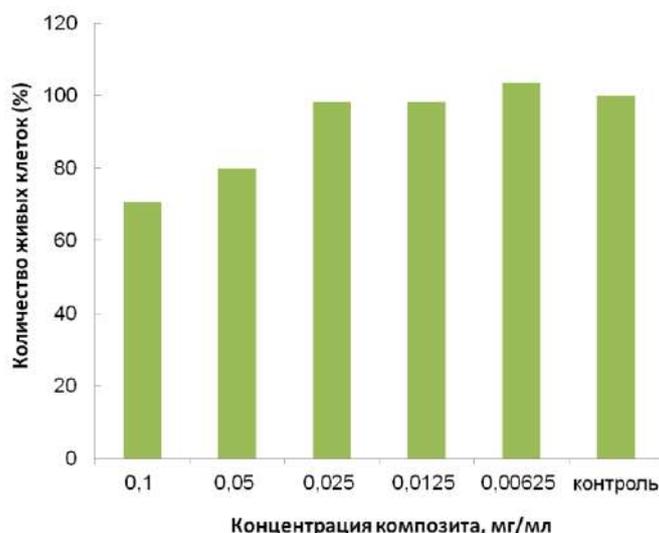


Рис. 1. Определение цитотоксичности полученного композита методом МТТ-теста.

Цитотоксичность гидрогеля исследовали с помощью МТТ-теста на клеточной линии L929 (фибропласты подкожной соединительной ткани мыши). После 72 часов инкубации клеточной линии с опытными веществами вносили в каждую лунку по 20 мкл рабочего раствора МТТ. Инкубировали еще 2 часа в условиях CO₂-инкубатора. Через 2 часа доставали планшет из CO₂-инкубатора, заменяли в каждой лунке среду на раствор ДМСО. Аккуратно встряхивали планшет до растворения кристаллов формазана. Оптическую плотность регистрировали при длине волны 450 нм и 620 нм на планшетном спектрофотометре (Multiscan FC). Оценку результатов теста МТТ проводили путем сопоставления оптической

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

плотности в опытных и контрольных лунках. По изменению оптической плотности судили о цитотоксической активности препарата. При исследовании цитотоксичности по отношению к клеткам L929 (рис. 1) при концентрациях 0,1 - 0,00625 мг/мл не оказывают токсического действия.

Работы выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.604.21.0156, идентификатор проекта RFMEF 160617X0156).

1. Mahrokh Dadsetan, Zen Liu, Matthias Pumberger, Catalina Vallejo Giraldo, Terry Ruesink, Lichun Lu, Michael J. Yaszemski. A stimuli-responsive hydrogel for doxorubicin delivery // *Biomaterials*. 2010. Vol.31. pp. 8051-8062.
2. Sood A., Granick M.S., Tomaselli N.L. Wound dressings and comparative effectiveness data // *Advances in wound care*. 2014;3(8). pp. 511–529.
3. N.N. Ferreira, L.M.B Ferreira, V.M.O. Cardoso, F.I. Boni, A.L.R. Souza, M.P.D. Gremião. Recent advances in smart hydrogels for biomedical applications: From self-assembly to functional approaches // *European Polymer Journal*. 2018. Vol. 99. pp. 117-133.
4. A.S. Lozhkomoev, E.A. Glazkova, O.V. Bakina, M.I. Lerner, I. Gotman, E.Y. Gutmanas, S.O. Kazantsev and S.G. Psakhie. Synthesis of core-shell AlOOH hollow nanospheres by reacting Al nanoparticles with water // *Nanotechnology*. 2016 27 205603.

DOI: 10.17223/9785946218412/209

**СОДЕРЖАНИЕ ФАЗ НА ТОБЕРИТОВОЙ ОСНОВЕ В CSH ГЕЛЕ
ПОРТЛАНДЦЕМЕНТА С РАЗНЫМ ВОДОЦЕМЕНТНЫМ ОТНОШЕНИЕМ**

Абзаев Ю.А., Гныря А.И., Коробков С.В.

Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск

Гель CSH относится к продуктам гидратации и к основным минералам портландцемента, его содержание достигает до 70% твердого вещества. В процессе твердения портландцемента при насыщении водой продуктов гидратации, вариации отношения Si/Ca структурные, механические характеристики CSH меняются и в существенной степени оказываются индивидуальными. Кристаллографической основой геля CSH, насыщенных молекулами воды является суперпозиция решеток Tobermorite, Jennite переменного состава. В работе проведено исследование рельефа поверхности, количественное содержание фаз в твердеющем портландцементе: 61.06 (алит), 13.62 (белит), 12.79 (феррит) и 6.50 (алюминат) в 100 граммах с водоцементным отношением (WC) 0.26; 0.30; 0.35 и 0.40. Рентгеноструктурный анализ образцов производился на Shimadzu XRD 6000 на медном излучении, по схеме Брегга-Бретано с шагом 0.02, временем экспозиции 0.5 сек, в угловом диапазоне 10–81° при напряжении 40 кВ и токе пучка 30 мА. Содержание фаз Tobermorite, Jennite (КФА) в портландцементе определялось методом Ритвельда. Исследование рельефа поверхности портландцемента и элементного состава производилось с помощью растровой системы Quanta 200 3D. Элементный анализ показал, что в портландцементе исследуемых составов и разным содержанием WC доминируют кислород (O), кремний (Si), кальций (Ca), а также алюминий, железо. В работе были проведены расчеты вкладов атомных факторов рассеяния вышеуказанных элементов, (с учетом атомного содержания элементов) и оценена величина пиксельной серости основных фаз на поверхности портландцемента. Корреляционная связь между указанными факторами показала, что в рамках градации серого на поверхности доминируют фазы на основе Tobermorite, Jennite. Для определения количественного содержания фаз в портландцементе методом Ритвельда были использованы эталоны решеток Tobermorite, Jennite из открытой кристаллографической базы, эталоны Tobermorite с переменным составом молекул воды, предложенные Ричардсоном [1]. Продукты гидратации Tobermorite и Ettringite, включают в свою решетку молекулы воды. Анализ вкладов показал, что в портландцементе доминируют продукты гидратации Tobermorite (доля 0.41), Jennite (0.13) при WC=0.26; Tobermorite (доля 0.68), Jennite (0.31) при WC=0.30; Tobermorite (доля 0.06), Jennite (0.93) при WC=0.35; Tobermorite (доля 0.65) при WC=0.40. Присутствуют также клинкерные минералы алит, белит (табл.). Результаты КФА согласуются с моделированием в программном комплексе GEMs. Полученные результаты свидетельствуют о том, что водоцементное отношение оказывает существенное влияние на механизмы твердения доминирующей фазы CSH. Среди обнаруженных фаз наиболее высоким отношением Si/Ca характеризуется Jennite, доля которого соответствует портландцементу с WC=0.30. В работе обсуждаются данные о доле химически (внедренные в решетку), физически (переходных областях) связанной, а также свободной (в пористом пространстве) влаги, прочностные характеристики портландцемента, найденные экспериментально по кривым деформации, а также расчетным упругим характеристикам в рамках молекулярной динамики в коде GULP

1. I. G. Richardson. Model structures for C-(A)-S-H(I). / Acta Crystallographica Section B. 2014. B70, 903–923.

DOI: 10.17223/9785946218412/210

**ИССЛЕДОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЯЧЕЕК ЗПК
КОНИЧЕСКОЙ ФОРМЫ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УРОВНЯХ ЗВУКОВОГО ДАВЛЕНИЯ**

¹Писарев П.В., ¹Максимова К.А., ¹Храмцов И.В.

¹Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

Для обеспечения акустического совершенства авиационных двигателей требуется, с одной стороны, полное понимание процессов и источников возникновения шума, выявление факторов, определяющих его уровень, с другой стороны, необходим подробный анализ различных способов и мероприятий по снижению шума. Шум, создаваемый авиационным двигателем, имеет широкополосный характер с наличием тональных составляющих, существенно превышающих по уровню звукового давления широкополосные составляющие. Для снижения уровня шума двигателя в настоящее время широко используются резонансные звукопоглощающие конструкции (ЗПК), настроенные на заданный частотный диапазон. Отличительной особенностью таких конструкций являются резонаторы Гельмгольца, способные поглощать звуковые волны определённых частот в зависимости от геометрии резонаторов [1, 2].

Поэтому при проектировании ЗПК необходимо правильно подбирать их параметры, а также сочетание конфигураций и форм резонаторов, обеспечивающих наиболее эффективное подавление шума двигателя на заданных частотах [3-6].

Для проведения ряда вычислительных экспериментов были построены две геометрические модели. Обе модели состоят из канала круглого сечения (свободный объем интерферометра) и присоединенного свободного объема ячейки в виде конуса и перевернутого конуса. На рисунке 1 представлен общий вид геометрических моделей где: 1- канал конечной длины круглого сечения, по центру на одном из торцов расположена ячейка - 2 призматической формы, соединенная с каналом "узким" горлом - 3 цилиндрической формы.

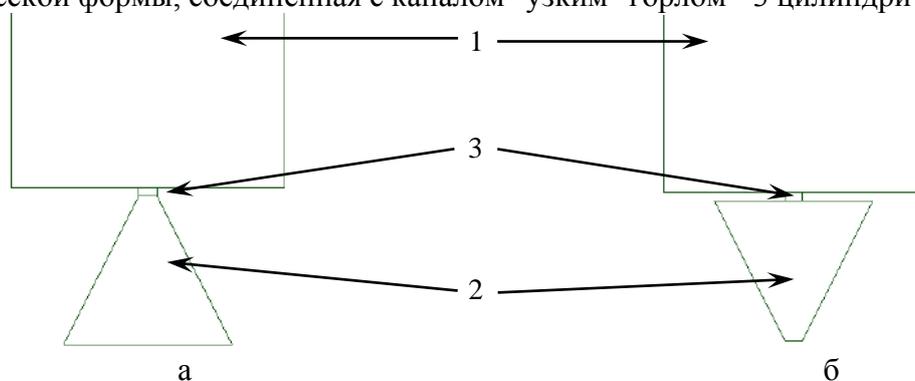


Рисунок 1 - Геометрическая модель с ячейкой в виде: а - конуса; б - перевернутого конуса

В рамках численных экспериментов осуществлялся расчет величины демпфирующего эффекта, производимого выбранными ячейками в диапазоне рабочих частот 500-3000 Гц. Исследования проводились при уровнях звукового давления 100 и 130 дБ.

По результатам вычислительных экспериментов были получены зависимости коэффициента звукопоглощения от частоты, а также распределение полей акустического давления.

Выявлено, что наибольшей акустической эффективностью обладает ячейка в виде конуса с основанием направленным вниз. Анализ полученных результатов выявил, что при переходе с линейного режима работы в нелинейный режим происходит падение акустической эффективности на 17%.

Были проведены лабораторные эксперименты на интерферометре с нормальным падением звуковой волны для ячейки в виде конуса. При линейном режиме работы акустическая эффективность ячейки равна 0,91, при нелинейном режиме работы - 0,76 при резонансной частоте 1260 Гц.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Сравнительный анализ результатов численных расчетов с результатами лабораторных испытаний выявил, что разница составила не более 10%. Погрешности в значениях величин могут быть обусловлены, прежде всего, разной жесткостью конструкций из разных материалов.

На следующих этапах работы, планируется проведение исследования совместной работы группы конических ячеек.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-38-00828).

1. Захаров А.Г., Аношкин А.Н., Паньков А.А., Писарев П.В. Акустические резонансные характеристики двух- и трехслойных сотовых звукопоглощающих панелей // Вестник ПНИПУ. Аэрокосмическая техника. 2016. № 46. С.144-158.
2. Писарев П.В., Захаров А.Г., Аношкин А.Н., Мерзлякова Н.А. Численный расчет акустической эффективности ячеек ЗПК складчатой формы // Научно-технический вестник Поволжья. 2018. №5. С. 136-139.
3. Pisarev P.V., Anoshkin A.N., Pan'kov A.A. Effect of neck geometry of resonance cells on noise reduction efficiency in sound absorbing structures // AIP Conference Proceedings. 2016. № 1770. 030119. doi: 10.1063/1.4964061.
4. Anoshkin A.N., Pan'kov A.A., Pisarev P.V. Analysis of acoustic pressure in model channel with cylindrical Helmholtz resonator // Scientific and technical volga region bulletin. - 2015. - №1. - pp. 354–357.
5. Selamet A., Radavich P.M., Dickey N.S. Novak J.M. Circular concentric Helmholtz resonators // The Journal of the Acoustical Society of America. 1997. № 101(1). pp. 41-51.
6. Selamet A., Dicky N.S., Novak J.M. Theoretical, computational and experimental investigation of Helmholtz resonators with fixed volume: lumped versus distributed analysis // Journal of sound and vibration. 1995. № 187(2). pp. 358-367.

DOI: 10.17223/9785946218412/211

ЧИСЛЕННОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЛИНЕЙНОГО ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ СОТОВОЙ ЗВУКОПОГЛОЩАЮЩЕЙ КОНСТРУКЦИИ

¹Писарев П.В., ¹Ермаков Д.А., ¹Максимова К.А.

¹Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

С каждым годом ИКАО проводится ужесточение норм уровня шума самолетов. Возникает необходимость в усовершенствовании звукопоглощающих конструкций (ЗПК) для повышения характеристик гашения шума. ЗПК, кроме функции шумогашения, выполняют функцию несущей способности конструкции. При эксплуатации ЗПК самолета подвергается различного рода статическим и динамическим термосиловым нагрузкам. Поэтому, наряду с высоким уровнем снижения шума, звукопоглощающие панели должны обладать высокой прочностью и надежностью[1].

Одним из наиболее распространенных методов расчета, реализованный в большинстве инженерных пакетов, является метод конечных элементов(МКЭ). Использование МКЭ с детализированным полноразмерном моделированием многослойных ЗПК приводит к необоснованному увеличению вычислительных мощностей. Поскольку соотношение между минимальными и максимальными размерами структурных элементов может достигать до двух порядков, применяется подход, когда сложная часть конструкции, например звукопоглощающая панель, заменяется сплошным телом с эффективными упругими свойствами[2]. Для этого необходимо разрабатывать модели прогнозирования механических термоупругих характеристик ЗПК с учетом анизотропии свойств.

В настоящей работе представлены результаты численного прогнозирования эффективных упругих характеристик и коэффициентов линейного теплового расширения(КЛТР) ЗПК с сотовым наполнителем. При решении краевых задач в упругой постановке рассматривался представительный объем ЗПК с сотовым наполнителем, состоящий из пяти резонансных ячеек (см. рис. 1). Геометрические размеры представительного объема ЗПК, следующие: длина 48 мм, ширина 28,63 мм, высота 19,38 мм. ЗПК состоит из перфорированной верхней и неперфорированной нижней обшивки. Перфорированная и неперфорированная обшивки представляют собой слоистые композитные пакеты, выполненные из трех слоев стеклопластика со схемой армирования (0/90/0). Диаметр перфораций для перфорированной обшивки составляет 2мм. Толщина каждого слоя стеклопластика 0,23 мм. Между обшивками располагается сотовый наполнитель с высотой 18 мм.

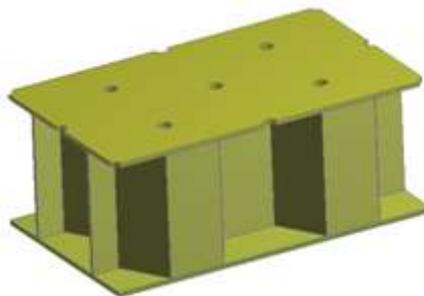


Рис. 1. Представительный объем ЗПК с сотовым наполнителем

Прогнозирование эффективных КЛТР ЗПК с сотовым наполнителем реализовано применением многоуровневого подхода. При решении термоупругой краевой задачи на первом уровне рассматривается текстильная ячейка периодичности (ЯП) слоя стеклопластика. ЯП состоит из стеклянных нитей с сатиновым переплетением 5/3 и эпоксидной матрицы. Ширина и длина ЯП составляют 4,6 мм, высота 0,23 мм, что равно толщине одного слоя стеклопластика. В результате решения краевой задачи определены эффективные значения КЛТР для стеклопластика.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

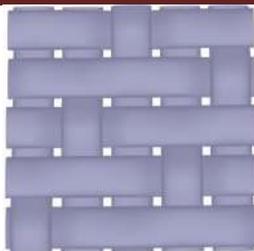


Рис. 2. Текстильная ячейка периодичности стеклопластика с переплетением 5/3 сатин

На втором уровне решается термоупругая краевая задача на представительном объеме ЗПК с сотовым наполнителем. В качестве исходных свойств стеклопластика рассматриваются значения эффективных КЛТР, полученные на ЯП слоя стеклопластика. В результате решения краевой задачи определены эффективные значения КЛТР ЗПК с сотовым наполнителем.

В результате проведенных исследований определены эффективные упругие характеристики и КЛТР ЗПК с сотовым наполнителем.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект № 18-79-00295).

1. Аношкин А.Н., Захаров А.Г., Городкова Н.А., Чурсин В.А. Расчетно-Экспериментальные исследования резонансных многослойных звукопоглощающих конструкций // Вестник ПНИПУ. Механика. 2015. №1.С. 5-20.
2. Anoshkin A.N., Pisarev P.V., Ermakov D.A. Numerical calculation of effective elastic characteristics of layer sound absorption structures // AIP Conference Proceedings. 2018. №2051. 020016. doi.org/10.1063/1.5083259.

DOI: 10.17223/9785946218412/212

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ДИФфуЗИИ С УЧЕТОМ ФОРМЫ ЗЕРНА

Чепак-Гизбрехт М.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

В настоящее время ведутся разработки в области создания новых материалов для работы в экстремальных условиях. Определение физико-механических свойств материалов, полученных различными методами измельчения структуры, является актуальным. Известно, что в условиях воздействия экстремальных нагрузок меняется не только структура, но и свойства. В условиях нагрева до температур, близких к температурам плавления, в сплавах возникают такие процессы как ползучесть, рекристаллизация, рост зерен, ускорение диффузии. По мере измельчения структуры возрастает роль зернограничной диффузии в таких процессах как ползучесть, сегрегация. Ускоренный перенос примесей в структурированном материале существенным образом сказывается на проводимости. Таким образом, значительный фундаментальный интерес представляет исследование зернограничной диффузии в иерархически структурированном материале.

Впервые оценки распределения концентрации из поверхности в монокристалл, содержащий изолированную границу, осуществил Фишер в 1951 году [1]. Частные решения, полученные на основе этой модели зернограничной диффузии, заложили основу для экспериментальных исследований, поскольку появилась возможность оценить ряд параметров, характеризующих зернограничную диффузию. Прошло еще около сорока с лишним лет исследований, результатом которых стала книга Каура И. и Густа В. [2]. В этой работе содержатся теоретические и экспериментальные данные, показывающие возможности и ограничения модели Фишера и её многочисленных модификаций. В частности, показано, что диффузия в материалах с микроструктурой не может быть описана в рамках упрощенной модели изолированной границы, поскольку пересечение диффузионных потоков из соседних границ вносит существенную погрешность не только при измерениях диффузионных параметров, но и при их теоретических оценках, следовательно, требуются дополнительные исследования. И по сей день идут активные исследования по решению этой проблемы.

В настоящей работе представлены расчеты распределения концентрации с учетом формы зерна в рамках двумерной модели зернограничной диффузии, предложенной в [3]. Модель включает уравнения диффузии в объемной и граничной фазах, начальные и граничные условия. Учитываются нагрев и перенос диффузанта из постоянного источника на поверхности вдоль границ и объемной фазы материала. Предполагается, что коэффициенты диффузии в объемной и граничной фазах зависят от температуры на основе уравнения Аррениуса. Решение задачи получено численно с использованием неявной разностной схемы и метода покоординатной прогонки. Численные расчеты показывают, что форма зерна существенным образом влияет на распределение концентрации в объемной фазе.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.1.4.

1. Fisher J.C. Calculation of Diffusion Penetration Curves for Surface and Grain Boundary Diffusion // Journal of Applied Physics. 1951. Vol. 22. P. 74-77.
2. Kaur I., Gust W. Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion. Stuttgart: Ziegler Press. 1989. 422 p.
3. Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G. Modeling of grain-boundary diffusion under nonstationary heating conditions // Computational continuum mechanics. 2019. Vol. 12. Iss. 1. P. 57.

DOI: 10.17223/9785946218412/213

**BONE-LIKE MULTILEVEL CALCIUM PHOSPHATE COATING
MODULATES AN INTERACTION OF MESENCHYMAL STEM CELLS
AND TUMOR CELLS**

¹Malashchenko V.V., ¹Shunkin E.O., ¹Shupletsova V.V., ¹Khaziakhmatova O.G.,

¹Yurova K.A., ¹Melashchenko E.S., ¹Litvinova L.S., ^{2,3}Khlusov I.A.,

⁴Komarova E.G., ⁴Chebodaeva V.V., ⁴Sharkeev Yu.P.

¹*Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, Russia*

²*Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

³*Siberian State Medical University, Tomsk, Russia*

⁴*Institute of Strength Physics and Materials Science of SB RAS, Tomsk, Russia*

Leukemia initiation and progression are connected with a disfunction of health cell microenvironment and human multipotent mesenchymal stromal cells (hMMSCs), in particular. Modern biomaterial biocompatibility research focuses the biomaterial hierarchic effects on MMSC behavior (that occur at the nano-, micro- and macroscales) because MMSCs are the fundamental units that produce/regenerate bone tissue. Scaffold-like micro-arc rough calcium phosphate (CP) coatings on titanium substrates have bone-like multilevel organization and influence both MMSCs (1) and tumor cell fate (2). Continuous monitored interaction of MMSCs and tumor cells is a promising tool for oncology, cellular and molecular biology, biotechnology and environmental research. The aim was to investigate a modulation of *in vitro* interaction of human MMSCs and leukemic T lymphoblasts (Jurkat T cells) caused by micro-arc CP coating with the help of Cell-IQ and RTCA advanced tools for continuous monitoring.

The method used was described closely by (3). Commercially pure titanium plates (10×10×1 mm³) were used as substrates for the deposition of CP coatings. Bilateral CP coatings were prepared in the anodal regime using a Micro-Arc 3.0 apparatus (ISPMS, Tomsk, Russia). An aqueous solution prepared from 20 wt % phosphoric acid, 6 wt % dissolved hydroxyapatite nanopowder (particles with a diameter of 40-100 nm), and 9 wt % dissolved calcium carbonate was used to obtain CP coating. Before biological testing, the samples were dry-heat sterilized.

One of each substrates with CP coating was placed in a well vertically at one edge of sterile 12-well plastic culture flat-bottom plates and attached to the wall of the well with a clip. In this position, the samples were not shifted when the plates were moved on the sample stage of the instrument and did not damage the forming cell layer. An average velocity of cell division (AVCD) of human adipose-derived MMSCs (hAMMSCs) contacted *in vitro* with allogenic Jurkat T cells was studied by means of Cell-IQ v2 MLF integrated phase-contrast microscopic platform for real-time surveillance imaging of living cells. Both 50 µL suspensions (5×10⁴ viable cells) of the CD73CD90CD105⁺hAMMSCs and Jurkat T cells were applied into the center of the well of 12-well plastic plates for 7 days at 100% humidity in a 5% CO₂ atmosphere at 37°C until the formation of a monolayer. A nutrient medium was once replaced. To determine cell invasion (chemotactic motility) through 8 µm pores the real-time cell analysis (RTCA DP Analyzer) with the CIM-plate was used.

Statistical processing of results was carried out using the SPSS 17.0 software package. The parameters (mean (X); standard deviation (SD)) were calculated. Because of non-normal distribution, non-parametric Mann-Whitney test was used to evaluate the significant differences between the samples.

SEM showed the microrelief of macroscale CP surface with irregularities. The peaks of the CP topography consisted of spherulites of up to 10–30 µm in diameter. Single or open interconnected pores (1–10 µm in diameter) were revealed. Atomic force microscopy (AFM) showed that CP relief was embedded with 500–1000 nm submicron particles. The particles assembled in globules that were 1–2 µm in diameter and 30 nm in height. The positioning of the globules provided porous (pores of 1–2 µm diameter) microspherulites (3–5 µm diameter, 300 nm in height).

An average velocity of cell division (AVCD) of fibroblast-like adherent hAMMSCs was 0.27-0.63 divisions/h. No micro-arc CP coating or Jurkat T cells influenced this process statistically (Table

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

1). At the same time, CP coating diminished significantly the percent of dividing hAMMSCs contacted with leukemic Jurkat T cells (Table 1, 3D-coculturing).

RTCA system showed hAMMSC invasion towards tumor cells and not vice versa. For all this, cellular interaction led to increasing viability of Jurkat T cells and decreasing the number of viable hAMMSCs.

Table 1. Behavior of hAMMSCs contacted in vitro with Jurkat T cells in 2D- or 3D-cultures for 7 days, X±SD

Group number	Cell culture	Software processing of Cell-IQ video images	
		An average velocity of cell division (AVCD), divisions/h before monolayer formation	% of dividing hAMMSCs
2D - coculturing			
1	hAMMSCs (control)	0.53 ± 0.36 n=13	85 ± 27 n=6
2	hAMMSCs + Jurkat T cells	0.41 ± 0.24 n=21	103 ± 56 n=10
3D - coculturing			
3	hAMMSCs (control)	0.45 ± 0.38 n=11	68 ± 34 n=7
4	hAMMSCs + Jurkat T cells	0.42 ± 0.21 n=21	14 ± 8(4)* n=6 P2=0.009; P3=0.01

Thus, Cell-IQ and RTCA are useful tools for *in vitro* real-time simulation and imaging of morphofunctional interplay between healthy cells and tumor cells. Tumor Jurkat T cells could control health hAMMSCs and promote stromal microenvironment for their survivability by means of secretable molecular products. Multilevel micro-arc CP coating forms bone-like inorganic structure that is capable to modulate *in vitro* interaction of human AMMSCs and leukemic T lymphoblasts. The results obtained may be useful for replacement surgery applications of orthopedic implants in cancer patients.

This research was funded by the Russian Science Foundation (Project no.16-15-10031).

1. Khlusov I.A., Dekhtyar Y., Sharkeev Yu.P., Pichugin V.F., Khlusova M.Y., Polyaka N., Tjulkins F., Vendinya V., Legostaeva E.V., Litvinova L.S., Shupletsova V.V., Khaziakhmatova O.G., Yurova K.A., Prosolov K.A. Nanoscale electrical potential and roughness of a calcium phosphate surface promotes the osteogenic phenotype of stromal cells // *Materials*. 2018. V.11. Article 978.
2. Litvinova L.S., Shupletsova V.V., Yurova K.A., Melashchenko E.S., Khaziakhmatova O.G., Sharkeev Yu.P., Khlusov I.A. A New approach to cultivation of immunocompetent cells // *BIOLOGICHESKIE MEMBRANY*. 2018. V.35(2). P.159-165.
3. Litvinova L.S., Shupletsova V.V., Yurova K.A., Khaziakhmatova O.G., Todosenko N.M., Khlusova M.Yu., Slepchenko G.B., Cherempey E.G., Sharkeev Yu.P., Komarova E.G., Sedelnikova M.B., Malashchenko V.V., Melashchenko E.S., Khlusov I.A. Cell-IQ visualization of motility, cell mass, and osteogenic differentiation of multipotent mesenchymal stromal cells cultured with relief calcium phosphate coating // *Doklady Biochemistry and Biophysics*. 2017. V. 476. P. 310–315.

**АНТИФРИКЦИОННЫЕ КОМПОЗИТЫ
НА ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРЭФИРКЕТОНА (ПЭЭК)**

²Нгуен дык Ань, ^{1,2}Панин С. В., ²Корниенко Л. А., ¹Иванова Л. Р.

¹*Институт физики прочности и материаловедения, СО РАН*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет*

Полиэфирэфиркетон (ПЭЭК), благодаря уникальному сочетанию различных физико-механических характеристик, является одним из перспективных конструкционных полимерных материалов. Этот полимер обладает рядом ценных эксплуатационных свойств, такими как: высокая прочность, высокая термическая и химическая стойкость, высокая биосовместимость и повышенная ударная вязкость. ПЭЭК отличается стойкостью к длительной эксплуатации при низкой и повышенной температуре (от -40 до 260 °С), сохраняя при этом отличные механические свойства. В последнее время активно разрабатываются композиты на основе полиэфирэфиркетона. В научной литературе обсуждаются возможности повышения износостойкости ПЭЭК введением различных твердосмазочных наполнителей [1-3].

В настоящей работе проведен сравнительный анализ с целью оценки влияния наполнителей в роли твердой смазки на механические и триботехнические характеристики композитов на основе ПЭЭК, наполненных органическими (политетрафторэтилен) и неорганическими (дисульфид молибдена) частицами в условиях сухого трения скольжения.

В работе использовали порошок ПЭЭК 450PF (Vitrex, Великобритания, размер частиц 50 мкм). В качестве наполнителей использовали политетрафторэтилен (ПТФЭ) Ф4-ПН20 (АО «Галополимер», размер частиц 6-20 мкм) в количестве 10 вес. % и дисульфид молибдена MoS₂ (Climax Molybdenum, USA, размер частиц 1÷7 мкм) в количестве 0,5 и 1 вес.%. Композиты на основе ПЭЭК получали методом горячего прессования при давлении 15 МПа и температуре 400 °С. Механические характеристики определяли при разрывных испытаниях на электромеханической испытательной машине Instron 5582 при растяжении образцов в форме двойной лопатки (ГОСТ 11262-80). Испытание образцов на изнашивание в режиме сухого трения проводили по схеме «шар-по-диску» при нагрузке $P=10$ Н и скорости скольжения $V=0.3$ м/с на трибометре CSEM CH-2000 (ASTM G99). Были использованы 2 типа контртел в форме шара: металлический и керамический. Металлический изготовлен из стали ШХ15, а керамической из ZrO₂. Диаметр шариков составлял 6 мм. Дистанция испытания равна 3 км, радиус траектории вращения – 10 мм. Структурные исследования проводили на растровом электронном микроскопе LEO EVO 50 (Carl Zeiss) при ускоряющем напряжении 20 кВ на поверхностях скола образцов с надрезом, механически разрушенных после выдержки в жидком азоте.

Результаты трибоиспытаний показали, что одновременное введение дисульфида молибдена и ПТФЭ при содержании первого не более 0,5 вес. % обеспечивает максимальную износостойкость композита при сохранении прочностных характеристик композиции. (износостойкость композита повышается в 38 раз при металло-полимерном сопряжении и в 15 раз при керамо-полимерном сопряжении).

Композит «ПЭЭК + 10 вес. % ПТФЭ + 0,5 вес. % MoS₂» может быть рекомендован в качестве эффективного антифрикционного материала для изделий в узлах трения как для металло-, так и керамо-полимерных трибосопряжений.

1. Jayashree Bijwe, Sukanta Sen, Anup Ghosh. Influence of PTFE content in PEEK–PTFE blends on mechanical properties and tribo-performance in various wear modes. *Wear* 258 (2005), 1536–1542
2. M. Zalaznik, M. Kalin, S. Novak, G. Jakša. Effect of the type, size and concentration of solid lubricants on the tribological properties of the polymer PEEK. *Wear* 364 (2016), 31–39
3. S. V. Panin, Duc Anh Nguyen, L. A. Kornienko, L. R. Ivanova and B. B. Ovechkin. Comparison of efficiency of solid-lubricant fillers for polyetheretherketone- composites. *AIP Coference Proceedings* 2015 (2018).

DOI: 10.17223/9785946218412/215

STRUCTURAL HETEROGENEITY OF ULTRAFINE-GRAINED FCC METALS PROCESSED THROUGH EQUAL-CHANNEL ANGULAR PRESSING ON MESO- AND MACROSCALE LEVELS

Ivanov K.V.

Scientific research institution - Institute of Strength Physics and Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russia

The structural peculiarities of ultrafine-grained (UFG) aluminum, copper and nickel processed with equal channel angular pressing (ECAP) were studied using transmission electron microscopy (TEM) and electron backscatter diffraction (EBSD) analysis. The heterogeneous grain size distributions were determined within the local scan areas of 300 to 2500 μm^2 (on a mesoscale level), and the subgrain size distributions were homogeneous. The grain size heterogeneity was caused by the presence of coarse grains that were poorly refined during the ECAP process, apparently due to an unfavorable orientation. The distributions of the average grain size and the fraction of high-angle grain boundaries obtained in the definite local areas were heterogeneous in bulk billets of UFG aluminum and copper on a macroscale level. The average subgrain size varied negligibly in different parts of the billets. The heterogeneous distribution of several structural characteristics on the macroscale level was likely due to the absence of a uniform distribution of shear strain in the billets subjected to ECAP.

DOI: 10.17223/9785946218412/216

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ГЕТЕРОГЕННОМ МАТЕРИАЛЕ
С ПРЯМЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ ЕГО МИКРОСТРУКТУРЫ**

¹Алексеев М.В., ¹Савенков Е.Б., ¹Березин А.В., ¹Марков М.Б., ²Садовничий Д.Н.

¹ИПМ им. М. В. Келдыша

²ФГУП ФЦДТ «Союз»

Создание материалов с заданными свойствами является актуальной научно-технической задачей. Ее основная цель - создание материалов, обеспечивающих заданные функциональные характеристики материала при заданных внешних воздействиях на него.

Оптимальный вариант параметров и технологии изготовления материала с заданными свойствами выбирают на основе анализа, сочетающего экспериментальные исследования с математическим моделированием. В настоящее время при моделировании композитных материалов чаще всего применяются различные методики усреднения их структуры и свойств. Эти подходы позволили получить множество практических результатов. Однако такие модели эффективны при анализе свойств образцов материалов на пространственных масштабах не меньших, чем масштаб усреднения. В то же время ряд важных процессов принципиально не могут быть проанализированы таким способом и требуют детального анализа процессов на масштабе (микро)неоднородностей. К таким процессам чаще всего относятся «дискретные» события типа разрушения или заполнение пор композита, электрического пробоя и т.д. Реалистичное математическое моделирование внешних возмущений в материале гетерогенного типа требует прямого учета его структуры на микроуровне. Такие задачи являются крайне сложными ввиду необходимости рассмотрения сеточных моделей образцов материала большой размерности. Естественным способом их решения является применение методов вычислительного эксперимента с использованием суперкомпьютеров.

Настоящая работа посвящена математическому моделированию процесса распространения электромагнитного поля в сложно устроенном материале с прямым разрешением его микроструктуры. В качестве объекта исследования выбран синтетический гетерогенный материал сложной (микро)структуры с изолированными включениями. Включения имеют форму сфер с существенно различающимися размерами и электрофизическими свойствами (диэлектрики и проводники). Геометрическая модель образца материала, то есть конкретного размещения внутри него сферических включений с заданными геометрическими свойствами, построена с помощью алгоритма Любачевского-Стилинджера [1,2].

Динамика распространения электромагнитных полей описывается в рамках полной нестационарной системы уравнений Максвелла. Результаты расчетов позволяют получить как непосредственно динамику электромагнитных полей, так и выполнить оценку влияния неоднородности материала и его гранулометрических характеристик на распространение электромагнитного поля. В общем случае микроструктура материала и его макроскопические свойства определяется распределением включений по размерам, форме и ориентации, а также объемной долей включений. Поэтому рассмотрены оценки влияния неоднородностей для регулярных сред, полученные экспериментальным путем [3], а также численно [4]. Проведено сравнение результатов расчета в неоднородной гетерогенной среде и соответствующих данных для гомогенных сред с эффективными параметрами (рис.1).

Для обсуждения этих вопросов поставлен ряд вычислительных экспериментов с различными электрофизическими характеристиками включений.

Применение разработанных программных комплексов представлено в виде результатов, полученных на вычислительном кластере К-100 в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 17-01-00301.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

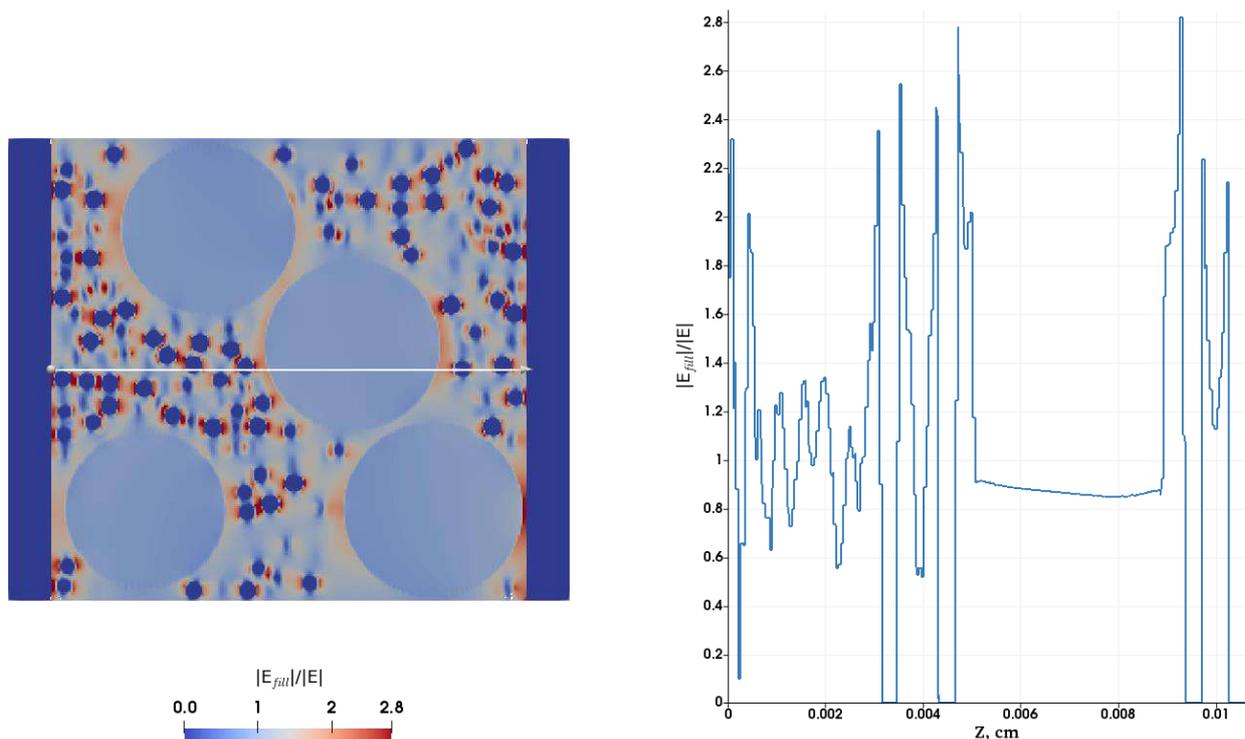


Рис.1. Распределение электрического поля. Сечение вдоль плоскости XZ, $Y = 0.0055$ см, $t = 0.1$ нс. На рисунке справа синяя линия соответствует распределению поля вдоль белой линии правого рисунка.

1. О моделировании радиационно-индуцированных термомеханических эффектов в гетерогенных материалах сложной дисперсной структуры / М.В.Алексеев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. No 32.
2. Packing hyperspheres in high-dimensional Euclidian spaces, Skoge, Donev, Stillinger, Torquato, 2007
3. Mendelson K. S. A theorem on the effective conductivity of a two-dimensional heterogeneous medium // J. Appl. Phys. 1975. V. 46, N 11. P. 4740, 4741
4. O. Pekonen, K. Kärkkäinen, A. Sihvola, and K. Nikoskinen, "Numerical testing of dielectric mixing rules by FDTD method," J. Electromagn. Waves Applicat., vol. 13, pp. 67–87, 1999.

DOI: 10.17223/9785946218412/217

**ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ В ПРОЦЕССЕ
ЭЛЕКТРОИСКРОВОГО ПЛАЗМЕННОГО СПЕКАНИЯ
АЛЮМИНИДА НИКЕЛЯ И ЦИРКОНИЯ**

Шевцова Л.И., Немолочнов Д.А., Волков Д.С.

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

edeliya2010@mail.ru, drakon13chik@mail.ru, astrul@mail.ru

Сплавы на основе Ni_3Al широко используются в качестве высокотемпературных материалов для ряда отраслей химической промышленности, авиационного и космического машиностроения. Помимо сочетания высокого комплекса физико-механических свойств, для интерметаллида Ni_3Al характерной особенностью является аномальная зависимость прочностных свойств от температуры нагрева, что объясняет возможность использования его в качестве самостоятельного жаропрочного материала в авиа- и ракетостроении.

Однако область применения соединения Ni_3Al ограничена его малой пластичностью при температуре окружающей среды и низким сопротивлением ползучести при повышенной температуре. Ранее исследователями было показано, что для повышения пластичности в интерметаллид Ni_3Al вводят малые (0,5-1,0 масс. %) добавки бора [1]. В то же время введение бора приводит к снижению пластичности сплава в интервале температур 300-850 °С за счет формирования борсодержащих эвтектик с пониженной температурой плавления. Длительность и сложность технологических процессов получения изделий из интерметаллидов также ограничивают область применения алюминида никеля. При длительном процессе спекания происходит рост зерна Ni_3Al , который сопровождается снижением механических свойств полученных материалов.

Анализ литературных данных по проблеме пластической деформации и разрушения алюминидов никеля показал, что пластичность и прочность интерметаллида Ni_3Al можно повысить путём добавления циркония [2, 3]. Для формирования заготовок из алюминида никеля с мелкозернистой структурой в последнее время используют технологию электроискрового плазменного спекания (SPS). Достоинствами метода являются кратковременность процесса спекания, равномерность распределения тепла по заготовке и возможность сохранения мелкозернистой структуры спеченного материала [4, 5].

Таким образом, цель данной работы заключается в исследовании влияния циркония на структуру и механические свойства алюминида никеля, полученного с использованием технологии электроискрового плазменного спекания с предварительной механической активацией порошков.

В качестве исходных материалов были использованы порошки никеля, алюминия и циркония. Для спекания были подготовлены смеси следующих составов: монофазный алюминид никеля Ni_3Al и Ni_3Al с добавлением 1 масс. % циркония. Формирование соединения Ni_3Al осуществляли в процессе самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. Смеси заданного состава подвергались трехминутной механической активации в планетарной шаровой мельнице АГО-2 с центробежным ускорением шаров равным 400 м/с². Спекание полученных механокомпозитов проводилось на SPS-установке Labox-1575 (производство Япония) с использованием токопроводящей графитовой пресс-формы с внутренним диаметром 30 мм. Процесс спекания осуществлялся при температуре 1100 °С и давлении прессования равном 40 МПа. Подробное обоснование выбора режимов спекания представлено в ранее выполненных работах [4, 5]. Для изучения структуры спеченных материалов использовались методы оптической металлографии, растровой электронной микроскопии и рентгенофазового анализа. В качестве основного показателя прочностных свойств материалов использовали величину предела прочности при трехточечном изгибе.

Рентгенофазовый анализ всех материалов после реализации стадий механоактивации и SPS свидетельствует об образовании интерметаллида Ni_3Al . Пики циркония на дифрактограммах спеченных заготовок не были зафиксированы, что связано с его малым

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

содержанием в сплаве. При реализации отмеченных выше режимов спекания микроструктура полученных материалов по всему объему является преимущественно однородной. В структуре образцов отсутствуют макротрещины. Относительная плотность спеченных материалов составляет ~ 97 % (теоретическое значение плотности Ni_3Al принято равным $7,5 \text{ г/см}^3$).

Уровень предела прочности при изгибе спеченной заготовки из алюминида никеля, легированного 1 % циркония, достигает 930 МПа. Это значение превышает прочность спеченного алюминида никеля (790 МПа). Следует отметить, что для интерметаллида Ni_3Al , полученного методом SPS, наблюдается интеркристаллитное разрушение. При добавлении в алюминид никеля 1 % (масс.) циркония характер излома изменяется с интеркристаллитного на смешанный (транскристаллитный и интеркристаллитный). Таким образом, добавление циркония в алюминид никеля благоприятно сказывается на свойствах спеченного материала.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-00436.

1. Aoki K., Izumi O. Improvement in room temperature ductility of the L1_2 type intermetallic compound Ni_3Al by boron addition // Journal of Japan Institute of Metals. 1979. Vol. 43. P. 1190–1196.
2. Li D., Gu Y., Guo J. Effect of zirconium on mechanical properties and grain boundary chemistry in Ni_3Al alloys // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1995. Vol. 364. P. 885–890.
3. Hujek P., Sulima I., Wierzbński S. Ductilization of Ni_3Al by alloying with boron and zirconium // Archives of Materials Science and Engineering. 2009. Vol. 40. No. 2. P. 69–74.
4. Shevtsova L.I., Bataev A.A., Mali V.I., Esikov M.A., Sun Shin Yan V.V., Nemolochnov D.A., Zimoglyadova T.A. The effect of preliminary mechanical activation on the structure and mechanical properties of $\text{Ni}_3\text{Al}+\text{B}$ material obtained by SPS // Key Engineering Materials. 2017. Vol. 743. P. 19–24.
5. Шевцова Л.И. Структура и механические свойства интерметаллида Ni_3Al , полученного по технологии искрового плазменного спекания механически активированной порошковой смеси // Обработка металлов: технология, оборудование, инструменты. 2014. № 3 (64). С. 21–27.

DOI: 10.17223/9785946218412/218

СТАБИЛЬНОСТЬ ДВУСТОРОННЕГО ЭФФЕКТА ПАМЯТИ ФОРМЫ К ПЕРЕГРЕВАМ И ПРОТИВОДЕЙСТВУЮЩИМ НАГРУЗКАМ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВА CoNiAl

Ефтифеева А.С., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.
Томский государственный университет, Томск

Система CoNiAl являются перспективной среди ферромагнитных сплавов за счет недорогих компонентов, способности испытывать термоупругое B2-L1₀ мартенситное превращение (МП) в ферромагнитном состоянии и хорошей пластичности в двухфазном (B2+γ)-состоянии [1]. Для того, чтобы упростить конструкцию и улучшить производительность термо- и магнитоиндуцируемых актюаторов для их рабочего тела используют материал с двусторонним эффектом памяти формы (ДЭПФ). Перспективной термообработкой для наведения ДЭПФ в ферромагнитных сплавах является выдержка в мартенситном состоянии под нагрузкой, как это было показано на сплаве CoNiGa, CuZnAl и AuCd [2, 3]. Однако, циклическое изменение противодействующей нагрузки и/или температуры в рабочем цикле может приводить к изменению микроструктуры и, соответственно, к деградации ДЭПФ. Поэтому целью работы является проверка стабильности растягивающего ДЭПФ к воздействию сжимающих напряжений и повышенных температур в монокристаллах ферромагнитного сплава CoNiAl.

Монокристаллы Co₃₅Ni₃₅Al₃₀ (ат. %) выращивали методом Бриджмена. Образцы гомогенизировали 8,5 ч при 1613 К и затем закаливали в воду комнатной температуры. Далее проводили выдержку при температуре 398 К в течение 1 ч в мартенситном состоянии под сжимающей нагрузкой 500 МПа, приложенной вдоль [110]_{B2}-направления. Теоретический расчет деформации решетки при B2-L1₀ МП показывает, что приложение сжимающей нагрузки вдоль [110]_{B2}-направления приводит к образованию раздвойникового мартенсита. Диффузионные процессы при выдержке способствуют установлению симметрии ближнего порядка атомов и точечных дефектов в соответствии с мартенситной конфигурацией и стабилизации раздвойникового варианта мартенсита. Соответствующая симметрия будет наследовать при охлаждении аустенитом, который в отличие от исходного, будет образовываться при более высоких температурах.

Стабилизация ориентированного L1₀-мартенсита приводит к наведению ДЭПФ. ДЭПФ измеряли вдоль [001]_{B2}-направления, перпендикулярно направлению выдержки, так как это направление характеризуется максимальной деформацией решетки до 8,6 % по сравнению с другими ориентациями [4]. В цикле охлаждения/нагрев в свободном состоянии вдоль [001]_{B2}-направления реализуется растягивающая обратимая деформация, то есть наблюдается растягивающий ДЭПФ с величиной ε_{ДЭПФ}=+6,5 %. МП развивается выше комнатной температуры, температура начала прямого превращения M_s составляет 326 К. На рисунке 1 а показана кривая деформации от температуры, демонстрирующая ДЭПФ после выдержки в мартенситном состоянии.

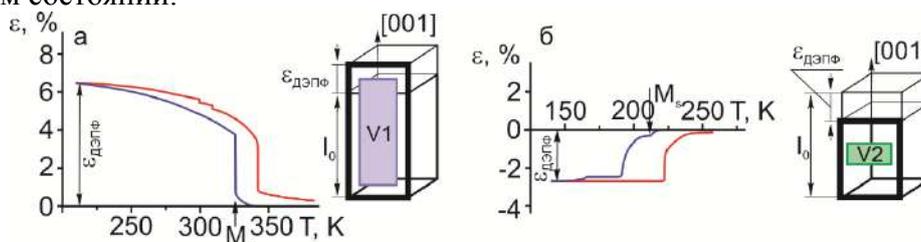


Рис. 1. Кривые деформации от температуры при минимальной сжимающей нагрузке $\sigma_{сж} = -3,7$ МПа в монокристаллах Co₃₅Ni₃₅Al₃₀: а – после выдержки в мартенситном состоянии, б – после СЭ при 523 К.

При обратимом МП тепловая энергия превращается в механическую работу, которую может совершать образец, преодолевая противодействующие напряжения $\sigma_{сж}$ [5]:

$$W_{\text{ДЭПФ}} = \sigma_{сж} \varepsilon_{\text{об}} / \rho \quad (1),$$

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

где $\varepsilon_{об}$ – деформация, наблюдаемая при приложенном напряжении $\sigma_{сж}$ и ρ – плотность материала. Согласно [5], максимальное значение работы выхода 0,12 Дж/г имеет сплав Ni_{24.5}Ti_{50.5}Pd₂₅, однако, монокристаллы Co₃₅Ni₃₅Al₃₀ после выдержки в мартенситном состоянии могут совершать большую работу 0,19 Дж/г.

Для выяснения стабильности растягивающего ДЭПФ к воздействию высоких температур и сжимающих напряжений, были проведены циклы сверхэластичности (СЭ) в условиях сжатия вдоль [001]_{B2}-направления при температурах от 373 К до 523 К с шагом 25-50 К. После каждого цикла нагрузка/разгрузка при определенной температуре измерен ДЭПФ в свободном состоянии при охлаждении/нагреве. В таблице 1 показаны соответствующие обратимая деформация и температура M_s при проявлении ДЭПФ после циклов СЭ.

Видно, что обратимая деформация и температура начала прямого МП являются стабильными до температуры 423 К, при которой максимальные достигаемые напряжения составляют 1025 МПа. Таким образом, ДЭПФ является стабильным к перегревам до температуры выдержки и сжимающей нагрузки до 1025 МПа.

Таблица 1. Функциональные характеристики ДЭПФ после соответствующих циклов СЭ.

Температура в цикле СЭ, К	Максимальные сжимающие напряжения в цикле СЭ, МПа	M_s , К	$\varepsilon_{дэпф}$, %
373	860	323	+7,1
423	1025	323	+6,8
473	1066	246	+7,4
523	1235	214	-2,7

Дальнейшее увеличение температур испытания и соответственно напряжений в цикле СЭ приводит к деградации ДЭПФ. Температура M_s снижается до 214 К, что близко к температуре исходных закаленных кристаллов. Испытания при 523 К могут приводит к процессам дисперсионного твердения, которые снижают температуры МП, вплоть до их подавления [1]. Обратимая деформация ведет себя стабильно до температуры 523 К и при данной температуре наблюдается дестабилизация мартенсита. Высокие сжимающие напряжения до 1235 МПа, действующие противоположно росту стабилизированного ранее варианта мартенсита, приводят к стабилизации другого варианта мартенсита, который ориентирован в соответствии с приложенными сжимающими напряжениями в цикле нагрузка/разгрузка. Этот вариант мартенсита приводит к сжимающему ДЭПФ с величиной $\varepsilon_{дэпф} = -2,7\%$ вдоль [001]_{B2}-направления (рисунок 1 б).

Таким образом, выдержка в мартенситном состоянии под нагрузкой, приложенной вдоль [110]_{B2}-направления, приводит к растягивающему ДЭПФ с величиной обратимой деформации +6,5 % вдоль перпендикулярного [001]_{B2}-направления, за счет стабилизации раздвойникового варианта L1₀-мартенсита. Полученный ДЭПФ стабилен к перегревам до температуры 423 К и противодействующим внешним напряжениям до 1025 МПа.

Данное научное исследование (№ НУ 8.1.06.2018 Л) выполнено при поддержке Программы повышения конкурентоспособности ТГУ.

1. Dadda J., Maier H.J., Karaman I., Chumlyakov Y.I. Cyclic deformation and austenite stabilization Co₃₅Ni₃₅Al₃₀ singlecrystalline high-temperature shape memory alloys // Acta Mater. 2009. V. 57. P. 6123–6134.
2. Niendorf T., Krooß P., Somsen C., Eggeler G., Chumlyakov Y.I., Maier H.J. Martensite aging – avenue to new high temperature shape memory alloys // Acta Mater. 2015. V. 89. P. 298–304.
3. Otsuka K., Ren X. Mechanism of martensite aging effects and new aspects // Mater. Sci. Eng., A. 2001. V. 312. P. 207–218.
4. Hamilton R.F., Sehitoglu H., Efstathiou C., Maier H.J., Chumlyakov Y., Zhang X.Y. Transformation of Co–Ni–Al single crystals in tension // Scr. Mater. 2005. V. 53. P. 131–136.
5. Atli K.C., Karaman I., Noebe R.D., Bigelow G., Gaydos D. Work production using the two-way shape memory effect in NiTi and a Ni-rich NiTiHf high-temperature shape memory alloy // Smart Mater. Struct. 2015. V. 24. P. 125023 (12pp).

DOI: 10.17223/9785946218412/219

**БОЛЬШИЕ ОБРАТИМЫЕ ДЕФОРМАЦИИ В СОСТАРЕННЫХ ПОД НАГРУЗКОЙ В
МАРТЕНСИТЕ МОНОКРИСТАЛЛАХ СПЛАВОВ NiFeGaCo и NiMnGa**

Панченко Е.Ю., Тимофеева Е.Е., Ларченкова Н.Г., Пичкалева М.В., Ефтифеева А.С.,
Тохметова А.Б., Тагильцев А.И., Суриков Н.Ю., Чумляков Ю.И.
Томский государственный университет, Томск

Впервые на монокристаллах сплавов NiFeGaCo и NiMnGa, ориентированных вдоль $[001]_A$ -направления, получены большие обратимые деформации (ферроэластичность (ФЭ)) до 13-15% за счет переориентации вариантов $L1_0$ -мартенсита в циклах нагрузка/разгрузка в широком интервале температур. Экспериментально показано, что во всех исследованных монокристаллах сплавов $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$, $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ и $Ni_{53}Mn_{22}Ga_{25}$ (at.%) эффективным способом для создания условий развития ФЭ под действием внешних сжимающих напряжений, приложенных вдоль $[001]_A$ -направления, является термомеханическая низкотемпературная обработка – старение в мартенсите под нагрузкой (СМН). Данная термомеханическая обработка заключается в проведении старения (выдержек) под нагрузкой при $T=423-498$ К в мартенситном состоянии, индуцированном сжимающими напряжениями вдоль $[110]_A||[100]_M$, что приводит к стабилизации преимущественного раздвойникового варианта мартенсита. Физические причины стабилизации мартенсита напряжений при СМН обусловлены снижением его свободной энергии за счет переориентации ближнего порядка в расположении точечных дефектов и атомов разного сорта в подрешетках в соответствии с симметрией тетрагонального $L1_0$ -мартенсита [1-3]. Ранее явление стабилизации мартенсита рассматривалось как вредный, неконтролируемый эффект, приводящий к деградации функциональных свойств за исключением последних работ, выполненных на монокристаллах сплава CoNiGa [2, 3]. Однако в данных работах такие функциональные свойства, как ФЭ не исследовали.

В исходных без специальной термомеханической обработки $[001]_A$ -кристаллах сплавов NiFeGaCo и NiMnGa в циклах нагрузка/разгрузка при действии сжимающих напряжений в мартенситном состоянии ($T < A_s$) заданная деформация, которая развивается за счет переориентации самоаккомодирующей структуры $L1_0$ -мартенсита, является обратимой только после снятия нагрузки и нагрева до $T > A_f$ за счет обратного $L1_0$ - $B2(L2_1)$ мартенситного превращения (МП), т.е. проявляется эффект памяти формы. При этом максимальная величина обратимой сжимающей деформации вдоль $[001]_A$ -направления не превышает теоретическую величину деформации $B2(L2_1)$ - $L1_0$ превращения 5-6 % (рис. 1 а).

СМН приводит к развитию деформации при $T < A_s$ в мартенситном состоянии за счет переориентации стабилизированного варианта $L1_0$ -мартенсита $OM1$, который увеличивает размеры образца вдоль $[001]_A$ -направления, в другой вариант мартенсита $OM2$, возникающего под действием сжимающей нагрузки. Полученная обратимая деформация при проявлении ФЭ достигает 13,0-15,0 %, что почти в 3 раза превышает экспериментальные значения величины обратимой деформации при проявлении эффекта памяти формы в этих образцах до СМН. ФЭ в $[001]_{B2}$ -монокристаллах $Ni_{51}Fe_{18}Ga_{27}Co_4$ характеризуется высокой устойчивостью к циклическим испытаниям, низкими критическими напряжениями $\sigma_{кр}=13-16$ МПа и достаточно узким механическим гистерезисом $\Delta\sigma=35$ МПа, не зависящим от степени деформации во всем температурном интервале ее проявления как при температурах вблизи комнатной, так и при пониженных температурах испытания вплоть до -70 °С (рис. 1 б).

Изменение химического состава сплава и наличие небольшой объемной доли включений γ -фазы в $[001]_{B2}$ -кристаллах $Ni_{49}Fe_{18}Ga_{27}Co_6$ после СМН приводит к развитию деформации в мартенсите при действии внешних сжимающих напряжений со значительным упрочнением, величина механического гистерезиса при проявлении ФЭ зависит от степени деформации и достигает $\Delta\sigma=50$ МПа при заданной деформации 13,0 %.

В $[001]_{B2}$ -монокристаллах $Ni_{53}Mn_{25}Ga_{22}$ после СМН получена ФЭ с обратимой деформацией 13,2 %. Однако заданная деформация является обратимой в кристаллах

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

$\text{Ni}_{53}\text{Mn}_{25}\text{Ga}_{22}$ только в узком температурном интервале вблизи $T=398$ К. При температурах $T < 398$ К переориентация вариантов мартенсита наблюдается при более низких критических напряжениях $\sigma_{\text{кр}} \approx 10\text{--}12$ МПа и заданная деформация 13,0 % является необратимой при снятии нагрузки. Поскольку переориентация мартенситных вариантов протекает при деформирующих напряжениях $\sigma = 10\text{--}12$ МПа, которые меньше величины механического гистерезиса $\Delta\sigma = 20$ МПа. Образец восстанавливает свои размеры только после нагрева до более высокой температуры $T \geq 398$ К.

Таким образом, для наблюдения ФЭ необходимо, чтобы деформирующие напряжения для переориентации вариантов мартенсита были выше, чем величина механического гистерезиса $\Delta\sigma$. Данное условие аналогично условию наблюдению сверхэластичности при развитии МП под нагрузкой [4].

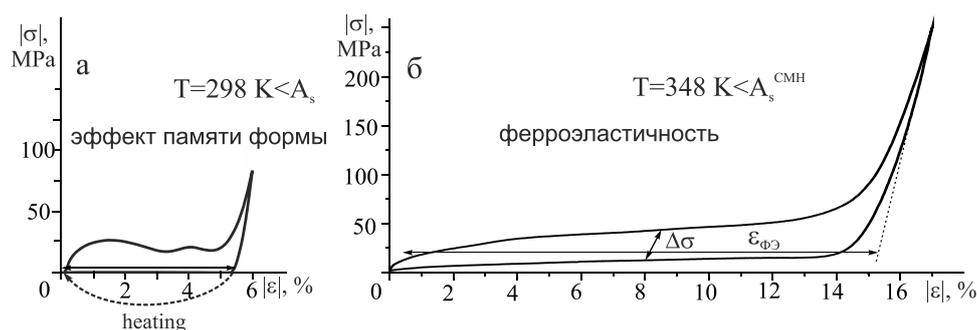


Рис. 1. Кривые $\sigma(\varepsilon)$ при сжатии вдоль $[001]_{\text{B2}}$ -направления для монокристаллов $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$, демонстрирующие эффект памяти формы до СМН (а) и ферроэластичность после СМН (б).

Используя кристаллографическую теорию МП проведен расчет максимальной теоретической деформации [5], связанной с переориентацией варианта мартенсита OM1 в OM2 при условии сжатия вдоль $[001]_{\text{A}}$ -направления, для исследуемых монокристаллов. Вдоль направления $[001]_{\text{A}} \parallel [001]_{\text{M}}^{\text{OM1}}$ теоретическое значение деформации за счет переориентации вариантов мартенсита составляет 16,6 % для кристаллов NiFeGaCo и 15,5 % для кристаллов NiMnGa . Экспериментально полученные значения обратимой деформации 13-15% при проявлении ферроэластичности близки к теоретическим значениям.

Монокристаллы ферромагнитных сплавов после СМН, проявляющие ФЭ в широком температурном интервале ниже 398 К с большой величиной обратимой сжимающей деформации до 15 %, могут найти широкое практическое применение в качестве рабочего тела демпфирующих устройств, термо- и магнитоконтролируемых датчиков и силовых приводов, способных работать как при температурах вблизи комнатной, так и при пониженных температурах испытания вплоть до -70°C .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 16-19-10250.

1. Otsuka, X. Ren. Mechanism of martensite aging effects and new aspects // *Materials Science and Engineering A*. 2001. V.312. С. 207-218.
2. Kadletz P., Krooß P., Chumlyakov Yu., et al. Martensite stabilization in shape memory alloys – Experimental evidence for short-range ordering // *Materials Letters*. 2015. V. 159. С.16-19.
3. Niendorf T., Krooß P., Somsen C., et al. Martensite aging – avenue to new high temperature shape memory alloys // *Acta Mater*. 2015. V. 89 С. 298-304.
4. Liu Y., Galvin S. Criteria for pseudoelasticity in near-equiatomic NiTi shape memory alloys // *Acta Mater*. 1997. V.45 С. 4431–4439.
5. Panchenko E., Timofeeva E., Eftifeeva A, et al. Giant rubber-like behavior induced by martensite aging in $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ single crystals // *Scripta Mater*. 2019.V. 162.C. 387-390.

DOI: 10.17223/9785946218412/220

РОЛЬ ОКСИДА FeO ПРИ СОЗДАНИИ МНОГОУРОВНЕВОЙ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ В ЗОНЕ СУХОГО СКОЛЬЖЕНИЯ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА

Фадин В.В., Алеутдинова М.И.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Взаимодействие шероховатых поверхностей при трении происходит на фактической площади контакта, которая заметно меньше, чем номинальная площадь контакта. Поэтому основные процессы (упругая и пластическая деформация [1], повышение температуры, образование химических соединений, адгезия и т.п.) при трении происходят в микрообъемах, прилегающих к пятнам контакта. Следует ожидать, что электрический ток вызовет дополнительный рост температуры и активацию названных процессов в зоне скользящего контакта, приводящих к износу контактного слоя. Разрушение зоны трения должно снизиться, если поверхностный слой будет иметь соответствующую структуру, обеспечивающую высокую износостойкость и высокую электропроводность контакта. Обычно в поверхностном слое образуются окислы, имеющие высокое удельное электросопротивление. Логично предположить, что отсутствие окислов обеспечит высокую электропроводность контакта. С другой стороны, окислы препятствуют адгезии и упрочняют поверхность. Поэтому представляет научный интерес изучить влияние окислов на структуру поверхностного слоя и характеристики контакта. Следует учесть, что первичная структура влияет на образование окислов. Целью настоящей работы является изучение взаимосвязи первичной структуры, содержания окислов в поверхностном слое и характеристик контакта при скольжении под воздействием электрического тока без смазки.

В работе применялись спечённые композиты составов Cu-Fe-графит и Cu-ШХ15-графит, где ШХ15 – подшипниковая сталь ШХ15, переработанная из шлифовальных отходов производства подшипников. Фазовый состав поверхности скольжения был получен на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3. Скольжение было осуществлено под воздействием переменного тока при давлении $p=0,13$ МПа, скорости скольжения $v=5$ м/с на машине трения СМТ-1 по схеме «pin-on-ring». Сталь 45 (50 HRC) служила контртелом.

С помощью X-ray анализа и Оже-спектроскопии было показано присутствие оксида FeO и некоторого количества меди (не более 20 ат.%) в поверхностных слоях композитов после скольжения. Это соответствовало высоким износостойкости и электропроводности контакта. Катастрофическое изнашивание начиналось при плотности тока около 300 А/см². Композиты, содержавшие более 50 ат.%Cu или высокую (более 25%) пористость в первичной структуре, были неспособны к образованию оксида FeO. Их поверхности скольжения содержали большое количество меди. Поэтому их износостойкость и электропроводность контактов имели низкие значения. Катастрофическое изнашивание начиналось при плотности тока около 100 А/см². Эти данные позволили предполагать образование градиентной структуры на основе оксида FeO. Такая структура обеспечивала многоуровневую релаксацию напряжений, что обусловило реализацию высоких износостойкости и электропроводности контакта. Было отмечено также, что отсутствие оксида FeO на поверхности скольжения контртела приводит к низким значениям износостойкости и электропроводности контакта.

В заключение можно отметить, что высокая износостойкость и одновременно высокая электропроводность контакта при сухом скольжении с высокой (более 100 А/см²) плотностью тока достигается в присутствии оксида FeO на контактирующих поверхностях.

Работа выполнена в рамках ПФНИ ГАН на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Панин В.Е., Почивалов Ю.И. и др. Трибоконтакт в парах трения как многоуровневая иерархически организованная система // Физ. мезомех. 2010. Т. 13. № 6. С. 27-34.

DOI: 10.17223/9785946218412/221

ВЛИЯНИЕ ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ В ПЕРВИЧНОЙ СТРУКТУРЕ КОМПОЗИТОВ НА УСТОЙЧИВОСТЬ ПРИ СДВИГЕ ИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЁВ В СУХОМ СКОЛЬЗЯЩЕМ КОНТАКТЕ С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ТОКА

Фадин В.В., Алеутдинова М.И.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Высокая работоспособность материала при экстремальных режимах трения обусловлена удовлетворительной способностью к релаксации напряжений в контактном слое. В некоторых условиях эксплуатации происходит неизбежная пластическая деформация поверхностного слоя и он разрушается в условиях малоциклового усталости. Если релаксация напряжений будет осуществлена путём локальных пластических микросдвигов в окрестности концентраторов напряжений, то можно ожидать минимального разрушения поверхностного слоя, что укажет на его вполне высокую усталостную прочность. Это условие можно выполнить за счёт применения пластичных металлов. Упрочнение первичной структуры (например, путём введения твердых фаз, легированием основы и т.п.) или упрочнение поверхностного слоя, например, ионной имплантацией, ХТО или другим способом создания твердого раствора, должно снижать его пластичность. Поэтому следует ожидать, что в условиях высокой пластической деформации износостойкость материалов, содержащих твёрдые растворы, будет ниже, чем износостойкость материалов, не имеющих твёрдые растворы. Целью настоящей работы является сравнительный анализ износостойкости металлических композитов с разными составами в условиях скользящего электроконтакта с высокой плотностью тока без смазки.

В работе применялись спечённые композиты составов Cu-графит-металл. Фазовый состав поверхности скольжения был определен на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3. Скольжение было осуществлено под воздействием переменного тока при давлении $p=0,13$ МПа, скорости скольжения $v=5$ м/с на машине трения СМТ-1 по схеме «pin-on-ring». Сталь 45 (50 HRC) служила контртелом.

Износостойкость является основным показателем прочности контактного слоя. Низкая износостойкость металлических композитов, основа которых содержит твёрдые растворы (например, сталь 110Г13, сталь Р6М5, сталь Х13М2) указывает на низкую прочность поверхностного слоя в процессе трения. Катастрофический износ этих материалов начинался при плотности тока менее 200 А/см². Кроме того, наличие твёрдых растворов приводит к снижению теплопроводности. Это вызывает увеличение градиентов температуры в зоне трения и, соответствующее ускорение разрушения контактного слоя. Отсутствие явных твёрдых растворов в основе (сталь ШХ15, железо) композита обеспечивало легкую релаксацию напряжений в поверхностном слое за счёт относительно высокой пластичности основы. Поэтому эти композиты проявили более высокую износостойкость. Это указывает на более высокую устойчивость к сдвигу на макромасштабном уровне. Необходимо учесть, что релаксация напряжений в поверхностном слое происходит путём структурного превращения и образования трибослоя, структурные элементы которого имеют вид частиц с низкими размерами. Релаксация напряжений должна происходить путём пластической деформации этих частиц. Твёрдые растворы в этих частицах затрудняют пластическую деформацию и напряжения релаксируются за счёт образования трещин.

В заключение можно отметить, что спечённые композиты, содержащие твёрдые растворы в своей первичной структуре, формируют поверхностный слой с относительно низкой прочностью при сухом скольжении под воздействием тока высокой (более 100 А/см²) плотности. Этот эффект связан с пониженной способностью твёрдых растворов к релаксации напряжений за счёт пластической деформации.

Работа выполнена в рамках ПФНИ ГАН на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/222

EFFECTS OF DEFORMATION OF THE HIGH-TEMPERATURE SYNTHESIS PRODUCT ON THE GRAIN SIZE OF THE Ni₃Al INTERMETALLIC COMPOUND SYNTHESIZED UNDER PRESSURE

Ovcharenko V.E., Akimov K.O., Boyangin E.N.

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia

Improving the strength properties of Ni₃Al intermetallic compounds in a wide temperature range is a current task when developing a new generation of heat-resistant intermetallic alloys. One of the key parameters determining the level of intermetallic compound operational properties is the grain size. It is theoretically shown that for ordered intermetallic compounds, which are characterized by low ductility under tension as a result of destruction along the grain boundaries, there is a critical grain size below which an increase in the crack resistance of the polycrystal occurs (the stress intensity coefficient K_{Ic} increases, the plasticity of the intermetallic compound increases) [1]. The significance of the problem is determined by the increased brittleness of the intermetallic compound, whose content in modern nickel superalloys reaches 89% [2]. Therefore, the use of known methods of plastic deformation for intermetallic compound grain refinement to increase its strength properties is very limited, but it is possible under the conditions of a volumetric exothermic reaction of the intermetallic compound in a powder mixture of nickel and aluminum [3-4]. It is known that the thermal effect of the bulk exothermic reaction of the Ni₃Al intermetallic compound formation in a powder mixture of nickel with aluminum reaches $9.7 \pm 1.9 \cdot 10^6$ J / kg with a self-heating of synthesis product to temperatures above 2000 K. The formation of grain nuclei in the synthesized intermetallic compound occurs in non-equilibrium thermodynamic conditions at the peak of the high-temperature synthesis product heating with grain growth at the stage of the intermetallic synthesis product crystallization. The retention of the grain structure in a highly dispersed state is possible under the conditions of synchronization of the bulk exothermic reaction and force compaction (deformation) processes of the high-temperature synthesis product (Fig. 1).

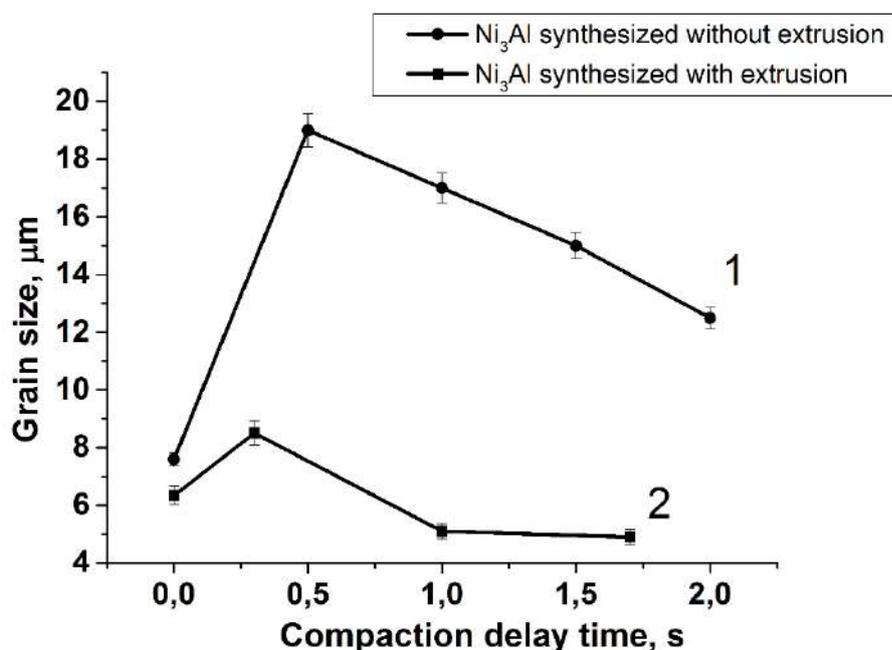


Fig.1. Dependence of grain size in the Ni₃Al intermetallic compound synthesized under pressure in closed (1) and open (2) die-molds on the delay time for the application of pressure to the high-temperature synthesis product.

It is established that an increase in the deformation ratio of the high-temperature synthesis product during its deformation in an open die-mold (with partial extrusion of the product of synthesis) leads to a fold decrease in the grain size in the intermetallic compound synthesized under pressure.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

The work was carried out as part of the Basic Research Program of the Russian Academy of Sciences for 2013–2020 (project No. 23.2.2.).

1. Kwai S. Chan. Theoretical analysis of grain size effects on tensile ductility // Scripta Metallurgica et Materialia. 1990. Vol.24. P. 1725-1750.
2. Pope D.P., Ezz S.S. Mechanical Properties of Ni₃Al and Nickel-Base Alloys with High Volume Fraction of γ' // Int. Met. Rev. 1984. V.29. № 3. P. 136–167.
3. Morsi K. Review: Reaction Synthesis Processing of Ni–Al Intermetallic Materials // Mater. Sci. Eng. A. 2001. V.299. P. 1–15.
4. Овчаренко В.Е., Боянгин Е.Н., Акимов К.О., Иванов К.В. Формирование зеренной структуры в синтезированном в режиме теплового взрыва интерметаллическом соединении Ni₃Al // Физика горения и взрыва. 2019.Т.55. №2. С. 76-81.

DOI: 10.17223/9785946218412/223

**ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ДВОЙНИКОВЫХ ГРАНИЦ ПРИ ОТЖИГАХ
ВЫСОКОМАРГАНЦЕВЫХ АУСТЕНИТНЫХ СТАЛЕЙ, ПОДВЕРГНУТЫХ
КРУЧЕНИЮ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ**

Майер Г.Г., Астафурова Е.Г.

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия

galinazg@yandex.ru

Изучено влияние постдеформационных отжигов на эволюцию микроструктуры и фазового состава монокристаллов высокомарганцевых аустенитных сталей Fe-13Mn-1,3C, Fe-13Mn-2,7Al-1,3C, Fe-28Mn-2,7Al-1,3C (мас.%) с разной энергией дефекта упаковки (ЭДУ), подвергнутых кручению под высоким давлением (КВД). КВД закаленных от 1100 °С монокристаллов проводили при комнатной температуре и давлении 6ГПа, число оборотов наковальни (N) варьировали от 1 до 5. После КВД образцы отжигали при температурах 400, 500, 600, 700, 800°С с продолжительностью выдержки 1 час.

Методом просвечивающей электронной микроскопии показано, что независимо от состава стали, механическое двойникование развивается активно уже после одного оборота КВД и его активность зависит от величины ЭДУ стали. Среднее расстояние между двойниковыми границами уменьшается при увеличении числа оборотов КВД для сталей Fe-13Mn-2,7Al-1,3C и Fe-28Mn-2,7Al-1,3C (ЭДУ=40мДж/м² и ЭДУ=60мДж/м², соответственно). В стали Fe-13Mn-1,3C с самой низкой величиной ЭДУ (≈ 30 мДж/м²) плотность двойниковых границ слабо изменяется с увеличением степени деформацией КВД. Для стали Fe-13Mn-1,3C плотность двойниковых границ ($\rho_{\text{дв}}=2,5 \times 10^{14}$ м⁻²) после 5 оборотов КВД имеет самые высокие значения из трех исследуемых сталей ($\rho_{\text{дв}}=2,7 \times 10^{13}$ м⁻² и $\rho_{\text{дв}}=8 \times 10^{13}$ м⁻² для Fe-13Mn-2,7Al-1,3C и Fe-28Mn-2,7Al-1,3C сталей соответственно), а склонность к образованию полос локализованной деформации в ней самая низкая.

Методами электронной микроскопии и металлографии выявлено, что макроскопическая сетка двойниковых границ, сформированная при КВД, сохраняется во всех исследуемых сталях до температуры отжига 500°С, а в стали Fe-28Mn-2,7Al-1,3C – до 600°С. На микроуровне, границы деформационных двойников устойчивы к отжигу до температуры 600°С независимо от состава исследуемых сталей. Установлено, что процессы рекристаллизации в исследуемых сталях определяются не устойчивостью двойниковых границ к отжигу, а устойчивостью стали к фазовому $\gamma \rightarrow \alpha$ превращению при нагреве. После отжига при 600°С рекристаллизация аустенитных зерен реализуется более однородно, с меньшей разнорзернистостью и с формированием более мелкого размера зерна в стали Fe-13Mn-2,7Al-1,3C, в которой наиболее интенсивно происходит распад аустенита при постдеформационных отжигках. А в более стабильных сталях Fe-13Mn-1,3C и Fe-28Mn-2,7Al-1,3C наблюдается преимущественный рост отдельных зерен и этот процесс реализуется существенно неоднородно.

Описанные выше микроструктурные особенности коррелируют с результатами рентгенофазового анализа. После КВД все исследуемые стали обладали однофазной аустенитной структурой. Анализ рентгенограмм показал, что стали сохраняют однофазную аустенитную структуру до температуры отжига 400°С, после отжигов при температурах 500 и 600°С наблюдаются рентгеновские линии, соответствующие аустениту и ферриту, при более высоких температурах отжига образуется преимущественно аустенитная структура. После отжига при температуре 800 °С на рентгенограммах присутствовали линии γ -железа и слабые линии цементита, а для стали Fe-13Mn-2,7Al-1,3C и феррита. Сталь Fe-28Mn-2,7Al-1,3C наиболее устойчива к фазовому переходу при нагреве.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №18-79-00149). Авторы благодарны профессору Ю.И. Чумлякову за монокристаллы сталей, предоставленные для исследований.

DOI: 10.17223/9785946218412/224

ПОЛУЧЕНИЕ РЕЦЕПТУРЫ КОМПОЗИЦИЙ ПОЛИФЕНИЛЕНСУЛЬФИДА С УГЛЕРОДНЫМИ ВОЛОКНАМИ РАЗЛИЧНОЙ ДЛИНЫ

^{1,4}Панин С.В., ^{1,2}Гришаева Н.Ю., ^{1,2}Бочкарева С.А., ^{1,2,3}Люкшин Б.А., ^{2,3}Панов И.Л.,
⁴Нгуен Дык Ань, ⁴Ле Ми Тхи Хиеп

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск,*

²*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск*

³*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

⁴*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

Полифениленсульфид (ПФС) является перспективным высокотемпературным конструкционным термопластом, обладающим высокими показателями свойств теплостойкости, жесткости, ударопрочности, гидролизо-химической стойкости, технологичности, формостабильности, высокой адгезии к большому количеству материалов (стеклу, керамике, титану, бронзе, стали). Однако чистый ПФС обладает низкой износостойкостью и высоким коэффициентом трения (>0.34), что ограничивает его применение в узлах трения.

Для повышения триботехнических характеристик полимеров, как правило, используют различные типы наполнителей, прежде всего твердосмазочные микрочастицы (политетрафторэтилен, дисульфид молибдена, графит, нитрид бора), а также нанонаполнители (углеродные нановолокна/нанотрубки, наночастицы на основе оксидов, нитридов, карбонитридов и т. п.). Совместное введение твердосмазочных и армирующих наполнителей в полимерную матрицу позволяет комплексно повысить трибомеханические характеристики, расширяя тем самым номенклатуру и области применения полимерных композитов с заданными эксплуатационными свойствами в узлах трения машин и механизмов.

В работе исследуется вопрос проектирования композиций с заданными механическими и триботехническими характеристиками на основе ПФС. В качестве армирующих волокон использованы короткие углеродные волокна (70 мкм) (КУВ) и рубленные углеродные волокна (2 мм) (РУВ). Цель работы заключается в определении содержания наполнителей для получения заданных (эффективных) свойств. В работе приведен пример, когда заданные свойства определяются следующими требованиями:

- твердость по Шору Д - не менее 81,9;
- объемный износ - не более 0,18 мм³;
- модуль упругости композитного материала - не менее 10670 МПа;
- деформация - не менее 0,94%;
- предел прочности при изгибе - не менее 98,2 МПа;
- плотность - не менее 1,454 г/см³;
- коэффициент трения - не более 0,26.

Используется подход к определению управляющих параметров (степени наполнения короткими или рубленными углеродными волокнами), придающих материалу заданные эффективные свойства или попадание их в заранее заданные их интервалы [1]. Подход заключается в следующем. На основе опорных точек – значений эффективных характеристик в зависимости от управляющих параметров – в пространстве состояний строятся соответствующие поверхности, т.н. поверхности отклика механических и триботехнических характеристик на значения управляющих параметров.

Опорные точки, служащие для нахождения требуемых параметров, в данной работе получены на основе физических экспериментов. После получения ряда опорных точек используется метод дополнения данных до регулярного массива с применением линейной интерполяции на основе интерполяционного полинома Лагранжа.

В итоге получают зависимости эффективных характеристик (объемного износа, модуля упругости, относительного удлинения и т.д.) которые строятся в виде поверхностей,

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

отражающих зависимости этих характеристик от управляющих параметров. Управляющими параметрами служат степень наполнения КУВ и РУВ.

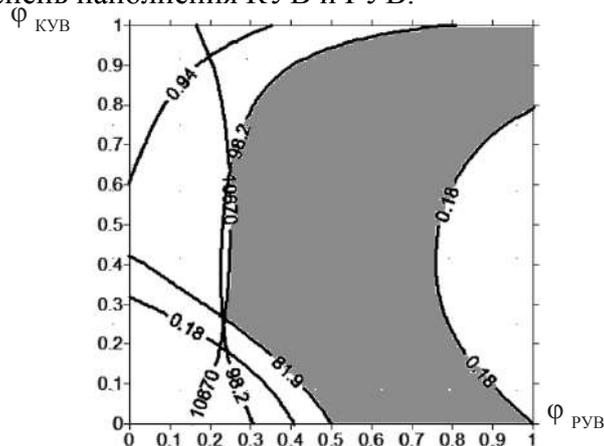


Рис 1. Область значений управляющих параметров, обеспечивающих соответствие физико-механических характеристик материала заданным ограничениям

На рис. 1 показана полученная область значений управляющих параметров, обеспечивающих соответствие физико-механических характеристик материала заданным ограничениям. Например, композиция на основе ПФС с составом: 30.5% РУВ (2 мм) и 10% КУВ (70 мкм) будет удовлетворять заявленным требованиям.

Предложенный и реализованный подход позволяет определять рецептуру многокомпонентных полимерных композиций с заданными свойствами на основе ограниченного количества экспериментальных данных. Метод обладает наглядностью и позволяет отсеять заведомо нереализуемые сочетания задаваемых эффективных характеристик.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке: 1) ПФИ ГАН на 2013-2020 годы по направлению фундаментальных исследований 23. [Регистрационный номер НИОКР АААА-А16-116122010041-9]; 2) РФФИ №18-58-00037_бел_а.

1. Дисперсно-наполненные полимерные композиты технического и медицинского назначения / Люкшин Б.А., Шилько С.В., Панин С.В. и др. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2017. – 311 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/225

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЗМА ДИСПЕРСИОННОГО ТВЕРЖДЕНИЯ НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ ВОДОРОДНОГО ОХРУПЧИВАНИЯ ВЫСОКОАЗОТИСТОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ, ЛЕГИРОВАННОЙ ВАНАДИЕМ

¹Панченко М.Ю., ¹Астафурова Е.Г., ¹Майер Г.Г., ¹Мельников Е.В., ¹Москвина В.А.,
¹Астафуров С.В., ^{1,2}Михно А. С., ^{1,2}Тумбусова И. А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

²*Национальном исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*

В работе исследовали закономерности водородного охрупчивания высокоазотистой аустенитной стали Fe-19Cr-22Mn-1,5V-0,15Ni-0,3C-0,9N (мас. %), подвергнутой закалке (1200°C, 30 мин.) и дисперсионному твердению при температурах 700 и 800°C (0,5 и 10 ч). Электролитическое наводороживание образцов проводили при 20°C в 3 % водном растворе NaCl, содержащем 3 г/л NH₄SCN, в течение 100 ч при плотности тока 100 А/м².

После закалки в стали наблюдается аустенитная структура с крупными частицами на основе ванадия (V,Cr)(C,N) (300–500 нм). После старения по режиму 700°C, 0,5 ч наблюдается прерывистый распад аустенита преимущественно по границам зерен с образованием ячеек нитрида хрома Cr₂N и аустенита, обедненного по атомам внедрения. Увеличение продолжительности и температуры старения (режимы: 700°C, 10 ч и 800°C, 0,5 и 10 ч) приводит к распространению реакции прерывистого распада от границ на все тело зерна (в части зерен), одновременно с этим процессом происходит гомогенное зарождение и рост наноразмерных нитридов ванадия в теле зерен, не претерпевших прерывистый распад, и образование интерметаллидной σ-фазы.

При наводороживании в закаленных образцах формируется поверхностный слой толщиной 10-15 мкм, который разрушается преимущественно интеркристаллитно хрупко. Помимо этого наблюдаются элементы транскристаллитного излома (квазисколов) и ямки от «выкрошенных» крупных частиц (V,Cr)(N,C). Центральная часть образца разрушается транскристаллитно вязко по аналогии с образцами, не насыщенными водородом. Формирование насыщенного атомами водорода поверхностного слоя не приводит к изменению предела текучести и уменьшению пластичности закаленных образцов.

В состаренных образцах наводороживание также не оказывает влияния на величину предела текучести, но значительно снижает их пластичность. С увеличением продолжительности старения склонность к водородному охрупчиванию увеличивается: коэффициент охрупчивания, характеризующий относительное изменение удлинения образцов из-за легирования водородом, составляет 35 % и 66 % для образцов, состаренных по режимам 700°C, 0,5 ч и 800°C, 10 ч, соответственно. После наводороживания образцов, состаренных по режиму 700°C, 0,5 ч, в поверхностном наводороженном слое (5–10 мкм) разрушение реализовывалось исключительно вдоль границ зерен (вдоль ячеек прерывистого распада), а на больших расстояниях от боковой поверхности наблюдали вторичные интеркристаллитные трещины и элементы вязкого разрушения (аналогично разрушению образцов без наводороживания). При увлечении продолжительности старения при 700°C до 10 ч и увеличении температуры старения до 800°C (0,5 и 10 ч) формирование наноразмерных частиц нитрида ванадия и рост пластин Cr₂(N,C) в аустенитных зернах способствует уменьшению толщины наводороженного слоя (≈5 мкм) по сравнению с закаленными образцами при аналогичном режиме насыщения. Помимо этого, происходит изменение механизма разрушения наводороженного слоя к транскристаллитному по механизму квазискола. Образование квазисколов и уменьшение толщины наводороженного слоя обусловлено формированием высокой плотности межфазных границ внутри зерен, претерпевших распад, которые являются местами преимущественного накопления атомов водорода и препятствуют его диффузии вглубь образца.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 17-19-01197).

DOI: 10.17223/9785946218412/226

**ТЕРМИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ МИКРОСТРУКТУРЫ
И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЖАРОПРОЧНОЙ МАЛОАКТИВИРУЕМОЙ
12%-Cr ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181**

^{1,2}Полехина Н.А., ²Алмаева К.В., ^{1,2}Литовченко И.Ю.,

^{1,2}Тюменцев А.Н., ³Чернов В.М., ³Леонтьева-Смирнова М.В.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия

³АО «ВНИИИМ им. академика А.А. Бочвара», Россия

Nadejda89tsk@yandex.ru

Исследована термическая стабильность микроструктуры и кратковременных механических свойств на растяжение малоактивируемой 12 %-ной хромистой ферритно-мартенситной стали ЭК-181 (16X12В2ФТаР) в интервале температур 700-800 °С. Исследования проводили после традиционной термической обработки (ТТО: нормализация при T = 1100 °С, 1 ч. + отпуск при T = 720 °С, 3 ч.) и ТТО + дополнительный отжиг в течение 1 часа при температуре испытания.

Электронно-микроскопические исследования показали, что дополнительные часовые отжиги стали ЭК-181 в исследуемом интервале температур не приводят к кардинальным изменениям гетерофазной структуры, полученной в результате традиционной термической обработки. Однако наблюдаются некоторые различия.

Отжиг при 750 °С после ТТО приводит к значительному увеличению плотности грубодисперсных частиц $M_{23}C_6$. Кроме того, в отличие от состояния без отжига (ТТО), где они преимущественно располагаются по границам мартенситных ламелей, после такой обработки карбиды $M_{23}C_6$ наблюдаются также внутри ферритно-мартенситной структуры.

Повышение температуры отжига до 800 °С помимо увеличения объемной доли частиц $M_{23}C_6$ приводит к формированию новых ферритных зерен благодаря развитию начальных стадий рекристаллизации. Происходит уменьшение плотности малоугловых границ с последующей трансформацией отпущенного мартенсита в ферритную структуру и увеличением средних размеров ферритных зерен. Тем не менее, размеры фрагментов ферритно-мартенситной структуры после указанного выше отжига остаются в пределах субмикроструктурного масштаба.

Важно отметить, что размеры мелкодисперсных (≤ 10 нм) частиц карбонитрида ванадия V(C, N) в процессе отжигов при T = 700-800 °С практически не изменяются, что свидетельствует об их значительно более высокой, по сравнению с частицами $M_{23}C_6$, термической стабильности.

При исследовании кратковременных механических свойств на растяжение образцов стали после ТТО установлено, что увеличение температуры испытаний от 700 °С до 800 °С приводит примерно к двукратному (от ≈ 225 МПа до ≈ 105 МПа, таблица) снижению величины предела текучести ($\sigma_{0,1}$) стали ЭК-181.

Таблица. Механические свойства стали ЭК-181 в интервале температур 700-800 °С.

Температура испытаний, °С	Режим обработки			
	ТТО		ТТО + отжиг при температуре испытаний	
	$\sigma_{0,1}$, МПа	δ , %	$\sigma_{0,1}$, МПа	δ , %
700	225	11	236	25
750	153	28	136	36
800	105	44	74	34

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Сравнительные исследования прочностных свойств стали в состояниях после ТТО и ТТО + дополнительный отжиг в условиях растяжения при температуре отжига показали (таблица), что:

- отжиг при $T = 700$ °С не приводит к снижению предела текучести, величина относительного удлинения до разрушения при этом увеличивается примерно в 2 раза;
- после отжига при $T = 750$ °С значения $\sigma_{0,1}$ снижаются незначительно (на ≈ 10 %).
- существенное различие (на ≈ 30 %) между значениями предела текучести до и после дополнительного отжига обнаружены только при 800 °С.

Сравнение с результатами электронно-микроскопических исследований свидетельствует о том, что снижение прочности стали после отжигов при 750-800 °С связано с увеличением объемной доли ферритной составляющей и размеров зерен феррита в результате процессов трансформации отпущенного мартенсита в ферритно-карбидную смесь, интенсивность которых увеличивается с ростом температуры.

На основе проведенных исследований можно заключить, что ферритно-мартенситная сталь ЭК-181 обладает достаточно высокой термической стабильностью микроструктуры и прочностных свойств вплоть до $T \approx 750$ °С.

Работа выполнена при поддержке Стипендии президента Российской Федерации для молодых ученых и аспирантов, осуществляющих перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям развития российской экономики (2019-2021 гг.).

DOI: 10.17223/9785946218412/227

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИ АКТИВИРОВАННОГО ПОРОШКОВОГО НИКЕЛИДА ТИТАНА

^{1,2}Абдульменова Е.В., ^{1,2}Кульков С.Н.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

Никелид титана имеет сложный фазовый состав с образованием фаз с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами [1]. Это представляет интерес с точки зрения их взаимодействия с водородом [2], поскольку различные фазы взаимодействуют с водородом по-разному. Например, $TiNi_3$ не способно накапливать водород [3], в то время как фазы Ti_2Ni [4] и $TiNi$ [5] поглощают водород уже при комнатной температуре. Наличие в материале дефектов кристаллической структуры [6] может оказывать влияние на взаимодействие материала с водородом. В порошковом состоянии увеличить плотность дефектов достаточно легко, например, методами высокоэнергетической механической активации [7]. В связи с этим, цель работы – изучить влияние механической активации порошкового $TiNi$ на его взаимодействие с водородом.

Порошок никелида титана марки ПН55Т45 производства АО «Полема» со средним размером частиц 11,1 мкм, стандартное отклонение которого составляет 7,5 мкм, подвергался механической активации (МА) в планетарной шаровой мельнице «АГО-2». Скорость вращения барабана составляла 1820 об./мин, что обеспечило ускорение 60g. Гидрирование реализовано электрохимическим методом по методике, описанной в [8]. Методами рентгенофазового и рентгеноструктурного анализов установлено, что исходный порошок состоит из нескольких фаз - $TiNi$ (B2) и $NiTi_2$ ($E9_3$) с кубической сингонией; $TiNi$ ($B19'$) с моноклинной сингонией и Ni_3Ti ($D0_{24}$) с гексагональной сингонией. Параметры решёток: для $TiNi$ (B2) составляет 0,30074 нм, для $TiNi_3$ составляет 5,0989 нм, для $TiNi$ ($B19'$) составляет 0,26902 нм, для $TiNi_3$ а – 0,50989 нм, с – 0,83077 нм.

Методом сканирующей электронной микроскопии показано, что МА приводит к немономонному изменению среднего размера частиц, при этом до 30 с МА размер уменьшается (7,8 мкм; sd=6,6 мкм), а после, только возрастает (33,2 мкм; sd=28,8 мкм), что свидетельствует о первоначальном разрушении частиц и последующей их агломерации.

С увеличением времени МА угловые положения линий различных фаз начинают смещаться, что обусловлено изменениями параметров решёток. Так для $TiNi$ (B2) параметр уменьшается на 0,3 %, для Ni_3Ti параметры уменьшаются на 0,8 %, для Ti_2Ni такое изменение составляет 0,5 %. Так же происходит значительное увеличение полуширин дифракционных максимумов всех фаз с увеличением времени МА, и при больших временах МА разделение линий уже невозможно (рис. 1, а).

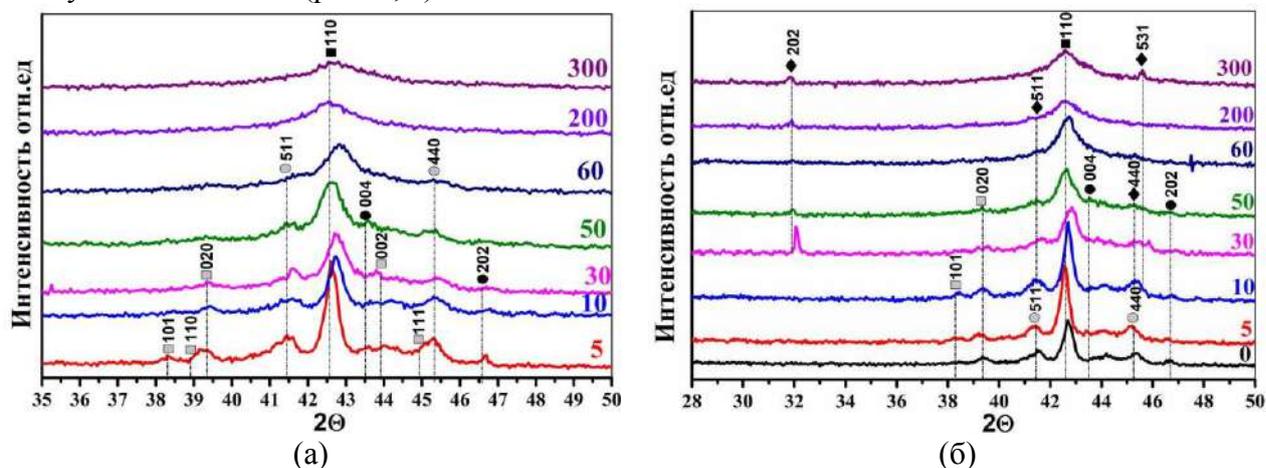


Рис. 1. Рентгенограммы порошков при разном времени механической активации (а) – до, (б) – после гидрирования: ■ – $TiNi$ (B2); ● – $TiNi$ (B19'); ♦ – Ti_2Ni ($E9_3$); ▲ – Ni_3Ti ($D0_{24}$); ◆ – Ti_2NiH_x ($E9_3$)

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

После гидрирования в течение 90 минут видно, что до 30 с МА изменений, как угловых положений, так и их полуширин не происходит (рис. 1, б). Параметры решёток TiNi (B2) и Ni₃Ti (D0₂₄) в пределах ошибки не меняются и соответствуют изменениям параметров решёток до гидрирования. Параметр решётки Ti₂Ni, увеличивается с 1,133 нм до 1,162 нм (2,5 %), причем после МА в течение 30 с появляются дополнительные пики, которые идентифицируются как принадлежащие гидридной фазе Ti₂NiH_x.

Из зависимости параметра решётки фазы Ti₂Ni после наводраживания при разном времени МА (рис. 2), видно, что до 10 с МА параметр решётки в пределах ошибки не изменяется. При 10 с параметр решётки увеличивается, а при 30 с он соответствует параметру решётки [pdf2 №27-0346], с составом гидрида Ti₂NiH_{0,5},

а при 300 с параметр решётки соответствует составу Ti₂NiH_{0,8}. Экстраполяция зависимости параметра решетки, показала, что для получения состава Ti₂NiH₁, т.е. параметра 1,179 нм [9] необходимо проведение МА в течение 3,5 часов, что не представляется возможным.

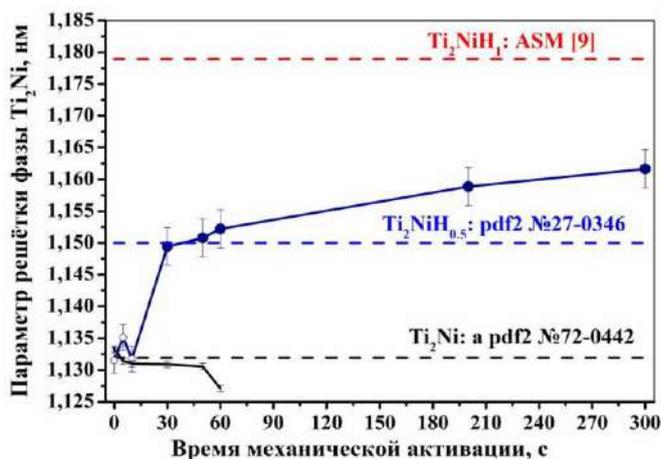


Рис. 2. Параметр решётки фазы Ti₂Ni при разном времени механической активации после наводраживания t = 90 мин:

— — — Ti₂Ni pdf2 №72-0442; — — — Ti₂NiH_{0,5} pdf2 №27-0346; — — — Ti₂NiH₁ ASM [9]; —●—
— Ti₂Ni до наводраживания; —○— Ti₂Ni после наводраживания; —●— Ti₂NiH_x после наводраживания

Работа выполнена в соответствии с Программой III.23 Фундаментальных научных исследований Государственных академий наук на 2013-2020 годы.

1. Massalski T.B. et al. Binary Alloy Phase Diagrams // ASM International. 1990. Volume 3. P. 2874 – 2876.
2. Drenchev B, Spassov T. Electrochemical hydriding of amorphous and nanocrystalline TiNi-based alloys // Journal of Alloys and Compounds. 2007. 441. P. 197 – 201.
3. Justi E.W., Ewe H.H., Kalberlah A.W. et al. Electrocatalysis in the nickel-titanium system // Energy Conv. 1970. 10. P. 183 – 187.
4. Van Rijswijk M.H.J. Metal hydride electrodes for electrochemical energy storage. 1978. London: Pergamon Press. Oxford. P. 261 – 271.
5. Buchner H, Gutjahr MA, Beccu KD et al. Wasserstoff in Intermetallischen Phasen am Beispiel des Systems Titan-Nickel Wasserstoff // Zeitschrift Fur Metallkunde. 63. 1972. – P. 497 – 500.
6. Yao X, Wu C, Du A et al. Metallic and carbon nanotube-catalyzed coupling of hydrogenation in magnesium // Chem. Soc. 2007. №129. P. 15650 – 15654.
7. Prochazka I., Cizek J., Havranek V., Anwand W., Defect studies of H implanted niobium // J. Alloys Compd. 645. 2015. P. 69 – 71.
8. Abdulmenova E, Vaulina O, Kulkov S. Electrochemical hydrogenation after mechanical activated near equiatomic Ti-Ni powder // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2019. 511. 012009
9. Luan B., Cui N., Zhao H., Liu H.K., Dou S.X.. Mechanism of early capacity loss of Ti₂Ni hydrogen-storage alloy electrode // Journal of Power Sources. 55. 1995. P. 101-106.

DOI: 10.17223/9785946218412/228

**ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ
МАЛОУГЛЕРОДИСТЫХ НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ ТРУБНЫХ Cr-Mo СТАЛЕЙ,
ЭКСПЛУАТИРУЕМЫХ В СЕРОВОДОРОДСОДЕРЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ**

¹Путилова Е.А., ¹Задворкин С.М., ¹Горкунов Э.С., ²Веселов И.Н., ²Пышминцев И.Ю.

¹ИМАШ УрО РАН, Екатеринбург

²ОАО «РосНИТИ», Челябинск

В нашей стране разведано значительное количество месторождений нефти и газа сосредоточенных в Арктической зоне: это месторождения на Ямале, Штокмановское в Баренцевом море и др. На шельфе содержится четверть разведанных в России запасов нефти и половина запасов газа. Однако если нефть залегает на глубинах 2000-3000 м, то природный газ накапливается на больших глубинах и зачастую содержит существенные количества агрессивных примесей, в том числе сероводорода и диоксида углерода. По мере увеличения глубины залегания углеводородов к материалам для обустройства скважин предъявляются требования все более высокой прочности в сочетании со стойкостью к воздействию агрессивных сред. Однако, как известно, чем выше прочность стали, тем выше склонность к сульфидному растрескиванию под напряжением (СРН).

Для нефтепромысловых труб, эксплуатируемых на больших глубинах и в условиях агрессивных коррозионных сред, традиционно применяют стали, разработанные на базе известных композиций машиностроительных сталей типа AISI 4130 (0,3 масс. % С; 1,0 масс. % Cr; 0,2 масс. % Mo). Стойкость стали к воздействию сероводородсодержащих сред обеспечивается в результате формирования дисперсной (мелкозернистой) однородной структуры с равномерно распределенными карбидами и, по возможности, низкой плотностью дислокаций. С точки зрения стойкости к СРН дисперсионное упрочнение предпочтительнее дислокационного, поскольку дислокации имеют повышенную способность улавливать и удерживать водород, что может привести к охрупчиванию материала. Признанным путем создания такой структуры является закалка на мартенсит во всем сечении и последующий длительный высокотемпературный отпуск. Как показывает опыт, в этом случае, в сталях с высоким содержанием молибдена (до 0,8 масс. %), микролегированных сильными карбидообразующими элементами ванадием и ниобием, формируются специальные карбиды, а достижение требуемого уровня прочности обусловлено их дисперсностью при низкой плотности дислокаций в отпущенной структуре, что обеспечивает достаточную стойкость против охрупчивающего воздействия сероводорода (водорода).

В докладе приведены результаты исследования структуры и физико-механических свойств высокопрочной малоуглеродистой низколегированной хромомолибденовой стали для нефтегазопромысловых труб, эксплуатирующихся в экстремальных климатических условиях.

Благодаря правильно подобранному химическому составу и уровню микролегирования, а также режиму термической обработки, позволяющему добиться упрочнения материала не путем дислокационного механизма упрочнения, а дисперсионного, в результате получили сталь с уровнем механических свойств, соответствующих трубным сталям класса прочности С110 ($\sigma_{0,2} = 805$ МПа, $\sigma_B = 840$ МПа, $\delta = 13,6$ %, $\psi = 41$ %, HV 0.05 300).

После закалки получили структуру отпущенного мартенсита с размером исходных аустенитных зерен 2-12 мкм. Отпущенный мартенсит представляет собой структуру с мелкими зернами неправильной формы. Последующий длительный высокотемпературный отпуск приводит к образованию сорбита отпуска, перегруппировке и уменьшению количества дислокаций в структуре стали и выделению карбидных фаз глобулярной формы, как в теле зерна, так и по его границам. Подобная структура является оптимальной для получения хорошего соотношения прочности и сопротивления сульфидному растрескиванию под напряжением.

С целью определения информативных параметров, которые могли бы быть использованы для осуществления контроля напряженно-деформированного состояния труб в

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

процессе эксплуатации, проводили определение магнитных характеристик не только в исходном состоянии, но и в процессе нагружения образца. Таким образом, было установлено, что остаточная индукция изменяется однозначно во всем диапазоне приложенных нормальных напряжений, и ее можно использовать как информативный параметр при магнитном контроле напряженно-деформированного состояния материала труб, который должен выдерживать большой вес обсадной колонны и обладать достаточным сопротивлением давлению горных пород.

При выполнении работы использовано оборудование ЦКП «Пластометрия».

DOI: 10.17223/9785946218412/229

ПОЛУЧЕНИЕ БИОСОВМЕСТИМЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Ti-Nb МЕТОДОМ ПОРОШКОВОЙ МЕТАЛЛУРГИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ РЕЛЯТИВИСТСКОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА ВНЕ ВАКУУМА

Глухов И.А.¹, Голковский М.Г.², Майрамбекова А.М.^{1,3}, Шаркеев Ю.П.^{1,4}

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, РФ, Томск

²Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, РФ, Томск

³Национальный исследовательский Томский государственный университет, РФ, Томск

⁴Национальный исследовательский Томский политехнический университет, РФ, Томск
gia@ispms.tsc.ru

Модуль упругости костной ткани находится в пределах (15-50) ГПа, а модуль упругости у большинства титановых сплавов, которые применяют в качестве материала для имплантатов, находится в пределах (100-120) ГПа [1]. Несоответствие модулей упругости приводит к биодеградации костной ткани [2]. Легирование титана ниобием позволяет понизить модуль упругости до 55-80 ГПа, что сопоставимо с костной тканью. Получение и применение в медицинских приложениях подобных сплавов является перспективным и активно развивающимся направлением. Однако у компонентов данного сплава, титана и ниобия, значительно отличаются температуры плавления. При применении традиционного металлургического метода (электродуговая плавка в металлургических печах с расходуемым или нерасходуемым электродом) требуется многократно выполнять переплавку слитка для достижения гомогенного состава по слитку. Применение выпущенного в атмосферу релятивистского электронного пучка, в качестве источника энергии для нагрева позволяет сформировать гомогенный слой сплава за один проход пучка [3]. Такой луч несет энергию достаточную для плавки с высокой скоростью достаточно большого объема исходных материалов.

В работе рассмотрен высокоэнергетический метод порошковой металлургии с применением релятивистского электронного пучка для получения на поверхности титановой подложки сплавов системы Ti-Nb [3]. В качестве источника энергии применялся промышленный ускоритель электронов ЭЛВ-6 с энергией электронов 1,4 МэВ. Плавка проводилась лучом, выпущенным в атмосферу. Шихта состояла из смеси фтористых солей CaF₂ и LiF в качестве флюса и смеси порошков Nb и Ti. Для реализации метода шихта наносилась на титановые подложки, после чего полученные заготовки помещались под электронный пучок [3].

Показано, что данным методом возможно получать сплавы с прогнозируемым элементным и фазовым составами. В зависимости от содержания Nb формируются α' -, α'' -, ω - или β - фазы. Показано, что полученные сплавы являются нетоксичными для клеток. Отметим, что выживаемость клеток остеосаркомы (клеточная линия MG-63) на поверхности полученных сплавов находится на уровне выживаемости клеток на поверхности “чистого” титана VT1-0. Микротвердость получаемых сплавов достигает 4800 МПа, а толщина сплавленного слоя составляла до 4 мм, что делает возможным изготовление из данного материала небольших изделий для медицинского применения.

Авторы выражают благодарность Эппле М., Примак О., Ротан О., Лоза К. за совместное выполнение исследований. Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 гг., направление III.23.2.

1. Жукова Ю.С., Дубинский С.М., Конопацкий А.С., Филонов М.Р. Биохимическая и биомеханическая совместимость наноструктурных сверхупругих сплавов на основе Ti-Nb для медицинских имплантатов // Перспективы развития фундаментальных наук [Электронный ресурс]: сборник трудов XII Международной конференции студентов и молодых ученых (Томск, 21–24 апреля 2015 г.) / Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2015. – 1556 с., с.971-973.

2. Попков А.В. Биосовместимые материалы в травматологии и ортопедии (обзор литературы) // Гений ортопедии №3, 2014 с.94-99

3. Sharkeev Yu.P., Golkovski M.G., Glukhov I.A., Eroshenko A.Yu., Bataev V.A., Fortuna S. V. Producing titanium-niobium alloy by high energy beam // AIP Conference Proceedings. - 2016. - 1698, P.050004-1-050004-6.

DOI: 10.17223/9785946218412/230

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ СТАЛИ AISI 304, ПОЛУЧЕННОЙ МЕТОДОМ ПРОВОЛОЧНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ПЕЧАТИ

Панченко М.Ю., Москвина В.А., Астафуров С.В., Майер Г.Г., Мельников Е.В.,
Рубцов В.Е., Колубаев Е.А., Астафурова Е.Г.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Одним из наиболее перспективных и быстро развивающихся подходов к производству объемных металлических изделий со сложной внутренней архитектурой является использования аддитивных технологий. Среди них можно выделить метод проволочной электронно-лучевой 3D печати, в рамках которого производимое изделие выращивается путем послойного наплавления из проволоки заданного состава. Интерес к данной технологии вызван возможностью быстрого получения деталей машин и механизмов сложной формы и различных размеров. Основной сложностью использования данной технологии является подбор технологических параметров (скорости сканирования и охлаждения, качество проволоки, мощность излучения и т.д.), позволяющих получить требуемые свойства производимого изделия. Одним из главных недостатков металлических изделий, полученных методом аддитивного производства, является анизотропия механических свойств, что значительно влияет на возможность использования напечатанных изделий в реальной промышленности. Одним из способов решения настоящей проблемы является проведения постпроизводственных термических обработок изделий, полученных с помощью электронно-лучевой печати. Настоящая работа посвящена исследованию влияния термической обработки (заковки) на микроструктуру и механические свойства аустенитной нержавеющей стали AISI 304, полученной методом проволочной электронно-лучевой 3D печати.

Стенки из стали AISI 304 (Fe-19.1Cr-9.1Ni-0.95Si-0.2Mo-0.2Co-0.2Cu-0.15Nb-0.1V-0.12C, масс.%) были произведены с использованием лабораторной установки для проволочной электронно-лучевой 3D печати. Размер стенок составлял 100×30×5 мм. Для проведения механических испытаний из стенок вырезались плоские образцы в форме двойной лопатки с размерами рабочей части 12×3×1.5 мм, ориентированные вдоль и поперек направления выращивания. Часть образцов подвергалась постпроизводственной термообработке, заключавшейся в часовом отжиге в среде инертного газа при температуре 1050 °С с последующей закалкой в воду. Одноосное растяжение образцов проводилось с начальной скоростью деформации $5 \times 10^{-4} \text{ с}^{-1}$. Размер зерна и фазовый состав стали определялся с использованием методов металлографии, дифракции обратно-рассеянных электронов и рентгеновского анализа.

Аустенитная нержавеющая сталь, полученная путем электронно-лучевой проволочной 3D печати, имеет гетерогенную столбчатую структуру. Размер зерна увеличивается с расстоянием от подложки, на который производилось выращивание стенки. Помимо макроскопической неоднородности зеренной структуры, аддитивно выращенные стальные заготовки обладают существенной микрогетерогенностью – в зернах аустенита наблюдается большое количество дендритных колоний высокотемпературного феррита, морфология которых зависит от положения в заготовке (внутри слоя/между слоями). Такая внутренняя гетерогенная структура определяет существенную анизотропию механических свойств аддитивно выращенного материала. Величины условного предела текучести и удлинения при одноосном растяжении изменяются в достаточно широком диапазоне – 250-310 МПа и 47-65% соответственно. Постпроизводственная термообработка приводит к снижению содержания ферритной фазы в заготовках, а также позволяет получить зерна более равноосной формы. В результате этого возрастает пластичность напечатанных образцов и уменьшается анизотропия механических свойств стали.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Государственных академий наук на 2013-2022 гг. (проект № III.23.2.7).

DOI: 10.17223/9785946218412/231

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТА УПАКОВКИ НА ПАРАМЕТРЫ СООТНОШЕНИЯ ХОЛЛА-ПЕТЧА ДЛЯ АУСТЕНИТНЫХ НЕРЖАВЕЮЩИХ СТАЛЕЙ

Астафуров С.В., Майер Г.Г., Мельников Е.В., Москвина В.А.,
Панченко М.Ю., Астафурова Е.Г.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Основным недостатком промышленно используемых аустенитных нержавеющей сталей на хромоникелевой основе являются низкие значения предела упругости и прочности. Использование термомеханических обработок, включающих различные комбинации пластической деформации и отжига, позволяет значительно уменьшить размер зерна в аустенитных нержавеющей сталях и, как следствие, повысить их прочностные свойства без существенной потери в пластичности. Многочисленные исследовательские работы показывают, что для аустенитных нержавеющей сталей связь предела текучести с размером зерна описывается соотношением Холла-Петча. При этом диапазон параметров этого соотношения достаточно велик и зависит от методов получения заготовок, характеристик зеренной структуры и рассматриваемого диапазона размеров зерен. Настоящая работа посвящена исследованию влияния энергии дефекта упаковки (ЭДУ) аустенитных нержавеющей сталей на значения параметров в соотношении Холла-Петча.

В качестве объектов исследования в работе рассматривали две аустенитные нержавеющей стали с разной ЭДУ: 01X17H13M3 (Fe-16,8Cr-13,3Ni-2,7Mo-1,7Mn-0,6Si-0,01C) и 12X18H10T (Fe-17,7Cr-9,8Ni-0,2Mo-0,6Ti-1,3Mn-0,5Si-0,11C, мас.%). Методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) были оценены величины ЭДУ таких сталей: $33,6 \pm 4,5$ мДж/м² для стали 01X17H13M3 и $20,6 \pm 1,7$ мДж/м² для стали 12X18H10T. С использованием холодной многоходовой прокатки (осадка до 80%) и постдеформационных отжига с различной длительностью при температурах 650-1050 °С были получены образцы сталей с различным размером зерна в диапазоне от 2,8 до 73,2 мкм для стали 01X17H13M3 и от 0,2 до 32 мкм для стали 12X18H10T. Образцы сталей с разным размером зерна были подвергнуты одноосному статическому растяжению с начальной скоростью $1,0 \times 10^{-4}$ с⁻¹.

Экспериментально установлено, что для исследуемых сталей зависимость условного предела текучести $\sigma_{0,2}$ от размера зерна описывается соотношением Холла-Петча (коэффициент корреляции 0,99):

$$\sigma_{0,2} = \sigma_0 + k_{HP} D^{-1/2},$$

где σ_0 – предел текучести в монокристалле, D – размер зерна, k_{HP} – коэффициент Холла-Петча. Значения параметров соотношения Холла-Петча, определенные на основе анализа экспериментальных данных, различны для двух исследуемых сталей: $\sigma_0=246$ МПа и $k_{HP}=325$ МПа×мкм^{0,5} для стали 01X17H13M3 и $\sigma_0=100$ МПа и $k_{HP}=404$ МПа×мкм^{0,5} для стали 12X18H10T. Экспериментально наблюдаемые различия значений параметров соотношения Холла-Петча для рассматриваемых сталей связаны с различием в величине их энергии дефекта упаковки, которая определяет особенности дислокационной структуры (величину расщепления полной дислокации $a/2\langle 110 \rangle$ на частичные дислокации Шокли $a/6\langle 211 \rangle$) и механизм деформации в материале (скольжение, двойникование). Величина σ_0 зависит от термически активируемого ближнего взаимодействия дислокаций (полных или частичных) с примесными атомами и дислокациями леса и имеет меньшие значения для стали с низкой ЭДУ. Сталь 01X17H13M3 с более высокой ЭДУ обладает более низким значением коэффициента Холла-Петча. Это обусловлено зависимостью величины k_{HP} от значений сдвиговых напряжений, необходимых для активации источников дислокаций у границ зерен (соответствующих напряжению $\tau_{ш}$), которые увеличиваются с понижением ЭДУ.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Государственных академий наук на 2013-2022 гг. (проект № III.23.2.7).

DOI: 10.17223/9785946218412/232

ЗАКОНОМЕРНОСТИ И МЕХАНИЗМЫ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ ВАНАДИЙСОДЕРЖАЩИХ ХРОМОМАНГАНЦЕВЫХ СТАЛЕЙ С ВЫСОКИМ СОДЕРЖАНИЕМ УГЛЕРОДА И АЗОТА

Астафурова Е.Г., Астафуров С.В., Майер Г.Г., Мельников Е.В., Москвина В.А.,
Панченко М.Ю., Гальченко Н.К., Тумбузова И.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Широкое распространение аустенитных сталей связано с рядом их преимуществ, таких как высокая пластичность, свариваемость, коррозионная стойкость и т. д. Недостатком таких сталей являются низкие прочностные характеристики, но эта проблема может быть решена за счет легирования атомами внедрения (азотом и углеродом). В частности, интерес представляет разработка хромоманганцевых сталей с совместным твердорастворным упрочнением азотом и углеродом. Такие стали обладают высокими прочностью и пластичностью, за счет легирования азотом в них сохраняется высокая коррозионная стойкость, а легирование марганцем позволяет снизить себестоимость стали за счет исключения из состава стали дорогостоящего никеля. Дополнительное легирование сталей ванадием позволяет формировать в сталях мелкозернистую структуру, упрочненную частицами на основе нитридов/карбонитридов ванадия. Настоящая работа посвящена исследованию закономерностей пластической деформации и разрушения ванадийсодержащих сталей с высоким содержанием азота и углерода $C+N > 1$ мас.% – Fe-19Cr-22Mn-1,6V-0,4C-0,8N ($C+N=1,2$ мас.%) и Fe-22Cr-26Mn-1,3V-0,7C-1,2N ($C+N=1,9$ мас.%). Образцы сталей выдерживали в течение часа в среде инертного газа при температурах 1100-1230°C с последующей закалкой в воду. Испытания на одноосное растяжение образцов осуществляли с начальной скоростью деформации $5 \times 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ в интервале температур от -60°C до 60°C.

Независимо от температуры выдержки под закалку, для обеих исследуемых сталей характерен комплексный механизм упрочнения: твердорастворное упрочнение аустенита атомами внедрения (азотом и углеродом) и дисперсионное твердение частицами на основе нитридов/карбонитридов ванадия и хрома. Установлено влияние исходного соотношения уровней твердорастворного упрочнения и дисперсионного твердения (при закалке от разных температур) на механические свойства и механизм разрушения исследуемых сталей. Увеличение температуры выдержки под закалку в интервале 1100-1200°C приводит к увеличению параметра решетки аустенита, что свидетельствует об усилении твердорастворного упрочнения. Вместе с этим происходит уменьшение объемной доли и среднего размера дисперсных частиц. Независимо от состава стали и температуры деформации, образцы характеризуются вязким транскристаллитным разрушением. Повышение температуры выдержки под закалку до 1230°C приводит к формированию зернограницных частиц, которые вызывают интеркристаллитное разрушение стальных образцов.

Экспериментально установлена температурная зависимость прочностных свойств, механизмов деформации и пластичности аустенитных хромоманганцевых ванадийсодержащих сталей с комплексным твердорастворным+дисперсионным упрочнением при одноосном растяжении. Установлено, что исследуемые стали с высоким содержанием атомов внедрения в твердом растворе аустенита и дисперсными частицами на основе хрома и ванадия проявляют сильную температурную зависимость предела текучести, свойственную сплавам внедрения с ГЦК кристаллической решеткой, но при этом не проявляют склонности к хрупкому разрушению по механизму квазискола в выбранном интервале температур деформации от 60 до -60 °C. Основными механизмами пластической деформации обеих сталей выступают дислокационное скольжение и механическое двойникование. Вклад от двойникования усиливается при понижении температуры деформации и с увеличением уровня твердорастворного упрочнения в сталях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Администрации Томской области (проект № 18-48-700042).

DOI: 10.17223/9785946218412/233

ВЛИЯНИЕ ПРОДОЛЖИТЕЛЬНОСТИ СТАРЕНИЯ НА МИКРОСТРУКТУРУ, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И МИКРОТВЕРДОСТЬ ВЫСОКОАЗОТИСТОЙ АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ

Тумбусова И.А., Майер Г.Г., Панченко М.Ю., Москвина В.А., Мельников Е.В., Астафуров С.В., Михно А.С., Гальченко Н.К., Астафурова Е.Г.

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия, galinazg@yandex.ru

С использованием методов сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии, рентгеноструктурного и рентгенофазового анализа изучали влияние продолжительности старения при температуре 700 °С на микроструктуру, фазовый состав и микротвердость высокоазотистой стали Fe-23Cr-17Mn-0,1C-0,6N (мас. %). Старение исходно закаленных от 1200°С образцов проводили в среде инертного газа в течение 0,5-50 ч.

В исходном состоянии после закалки исследуемая сталь имела структуру азотистого аустенита (γ_{N1} -фаза) с параметром решетки $a=3,629 \text{ \AA}$, а также содержала 18% δ -феррита с параметром решетки 2,88 \AA . Методом рентгеноструктурного анализа обнаружено, что старение при температуре 700 °С, 0,5 ч вызывает исчезновение рентгеновской линии, соответствующей δ -ферриту и размытие линий аустенита в сторону меньших углов дифракции. При этом на рентгенограммах наблюдали появление рентгеновских линий с межплоскостными расстояниями, соответствующими σ -фазе и нитридам хрома Cr_2N . После старения при температуре 700 °С с выдержкой более получаса на рентгенограммах идентифицируются отражения от исходной аустенитной фазы (γ_{N1}), аустенита, обедненного атомами внедрения (γ_{N2}), нитридов хрома Cr_2N и σ -фазы. С увеличением продолжительности старения при температуре 700°С увеличивается интенсивность линий, соответствующих σ -фазе и нитридам хрома Cr_2N , значения параметра решетки аустенита γ_{N1} изменяются слабо, но имеют тенденцию к уменьшению. Этот эффект обусловлен обеднением твердого раствора аустенита по азоту и углероду, в результате выделения частиц Cr_2N .

Электронно-микроскопические исследования микроструктуры стали показали, что после старения 0,5 часа зерна δ -феррита претерпевают распад с образованием мелкозернистой σ -фазы и аустенита, а на границах аустенитных зерен реализуется реакция прерывистого распада с образованием ячеек нитрида хрома. Старение при температуре 700°С способствуют быстрому увеличению доли превращенного объема материала, что при малой продолжительности выдержки (0,5-2 часа) в большой степени связано с распадом высокотемпературного феррита. После завершения распада δ -феррита скорость превращения уменьшается, и она определяется преимущественно прерывистым распадом аустенита и образованием нитридов хрома. С увеличением продолжительности старения, нитриды хрома растут в теле аустенитных зерен в виде пластин. Полного распада аустенита не происходит даже после 50-ти часов выдержки.

Последовательность фазовых и структурных превращений при старении определяет изменение микротвердости исследуемой стали. В исходном состоянии микротвердость стали составляла $3,09 \pm 0,08 \text{ ГПа}$. После старения микротвердость в зернах, претерпевших фазовый распад ($\gamma_{N1}\text{-Fe} + \sigma\text{-фаза} + \text{Cr}_2\text{N} + \gamma_{N2}\text{-Fe} + \delta\text{-феррит}$), существенно выше, чем в однофазных зернах азотистого аустенита ($\gamma_{N1}\text{-Fe}$). Старение в течение 1 часа сопровождается сильным увеличением микротвердости в зернах, претерпевших распад, в результате формирования интерметаллидной σ -фазы и дисперсионного твердения. Дальнейшее небольшое уменьшение микротвердости, при старении более 2 часов связано с процессами огрубления и коагуляции дисперсных фаз. После старения наблюдали небольшое увеличение микротвердости в аустенитных зернах, не претерпевших распад. Вероятно, это обусловлено эффектами предвыделений и непрерывного (гомогенного) выделения нитридов хрома в них.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 17-19-01197).

DOI: 10.17223/9785946218412/234

EFFECT OF TANTALUM ON THE TENSILE PROPERTIES OF 12%Cr MARTENSITIC STEELS FOR STEAM BLADES

Fedoseeva A.E., Nikitin I.S., Fedoseev A.E., Dudova N.R., Kaibyshev R.O.
Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

Co-modified 12%Cr martensitic steels are perspective materials for steam blades for fossil power plants which are able to work at ultra-supercritical parameters of steam ($T=620-650^{\circ}\text{C}$, $P=25-30$ MPa). The microstructure and mechanical properties of two Ta-containing and Ta-free Co-modified 12%Cr martensitic steels subjected to the normalizing at $1050-1070^{\circ}\text{C}$ and tempering at different temperatures ranging from 750 to 800°C were studied. After normalizing at $1050-1070^{\circ}\text{C}$, the average size of prior austenite grains was $50 \pm 5 \mu\text{m}$; the fraction of δ -ferrite was less than 10%. The tempering temperature strongly affected the tempered martensite/ferrite lath structure in both steels: the lath width increased from 290 ± 30 to 690 ± 50 nm and dislocation density decreased from 3×10^{14} to $1.5 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$ when tempering temperature increased from 750 to 800°C . The addition of Ta in the 12%Cr-3%Co steel provided the precipitation of Ta-rich MX carbonitrides after heat treatment. The tensile tests were carried out at 20°C and 650°C with a strain rate of $2 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. Insignificant increment in ultimate tensile strength and yield strength was revealed in Ta-containing 12%Cr steel.

Acknowledgment. The study was financially supported by President Grant for young scientists (grant number 075-15-2019-1165).

DOI: 10.17223/9785946218412/235

EFFECT OF HEAT TREATMENT ON STRUCTURE AND MECHANICAL PROPERTIES OF 12Cr-3Co STEEL WITH LOW N AND HIGH B CONTENTS

Nikitin I. S., Fedoseeva A. E., Odnobokova M.V., Dudova N. R., Kaibyshev R.O.
Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

The effect of heat treatment on the microstructure and mechanical properties of Fe_{bal}-0.1 wt.%C-12Cr-3Co-2.5W-1Cu-VNbTaBN steel was investigated. After normalization in the range of 1050-1150°C, the martensitic structure was dominant; δ -ferrite content was about 10%. When temperature of normalizing increased from 1050C to 1150°C, the average size of prior austenite grains increased from 44 to 68 μm . After tempering at 750, 770 and 800°C, tempered martensitic lath structure with a high dislocation density within martensitic laths contained nanosized M_{23}C_6 carbides along the boundaries of prior austenite grains and laths and (Ta,Nb)X carbonitrides randomly distributed in the ferritic matrix. The average sizes of M_{23}C_6 carbides and (Ta,Nb)X carbonitrides were 50 nm and 40 nm, respectively, independently of tempering temperature. The M_6C carbide particles were also observed along the boundaries of prior austenite grains and pockets as well as along the boundaries between δ -ferrite and martensite; their amount was negligible. When tempering temperature increased from 750 to 800°C, the particle density on the boundaries between δ -ferrite/martensite decreased from 3.8 to 0.2 μm^{-1} . A relationship between the lath size (h) and the density of free dislocations (ρ) obeyed:

$$h = 5.41\rho^{-0.5} - 0.07$$

Increasing the tempering temperature to 800°C led to a decrease in the hardness up to ~220 HB, yield stress and ultimate tensile stress up to 520 and 700 MPa, respectively.

Acknowledgment. The study was financially supported by President Grant for young scientists (grant number 075-15-2019-1165).

DOI: 10.17223/9785946218412/236

EFFECT OF WARM ROLLING ON GRAIN REFINEMENT AND MECHANICAL PROPERTIES OF AUSTENITIC STAINLESS STEEL

Odnobokova M., Belyakov A., Fedoseeva A., Kaibyshev R.

Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

The deformation microstructures of a 316L - type austenitic stainless steel subjected to warm plate rolling at temperature of 300°C to different total true strains (ϵ) of 0.5, 1, 2 or 3 and their effect on the mechanical properties were studied. The dislocation density rapidly increases above 10^{15} m^{-2} at early warm deformation ($\epsilon \approx 0.5$). The warm rolling was accompanied by grain refinement after straining to $\epsilon > 0.5$. The grain refinement was associated with development of deformation twinning and microshear banding which contribute to the appearance of ultrafine grains with size of less than 1 μm . The fraction of ultrafine grains after warm rolling to different total true strains was expressed using a modified Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov equation. The grain refinement leads to significant strengthening as a result the yield strength approached 1080 MPa after warm rolling to a total strain of 3.

Acknowledgment. The study was financially supported by President Grant for young scientists (grant number 075-15-2019-1165).

DOI: 10.17223/9785946218412/237

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЧНОСТИ ЭЛЕМЕНТОВ
КОСМИЧЕСКОЙ ТЕХНИКИ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ МЕЛКИХ ФРАГМЕНТОВ
КОСМИЧЕСКОГО И ТЕХНОГЕННОГО МУСОРА**

¹Добрица Д.Б., ²Жалнин Е.В., ²Пашков С.В., ²Христенко Ю.Ф.

¹*Акционерное общество «Научно-производственное объединение им. С.А. Лавочкина».*

²*Научно-исследовательский институт прикладной математики и механики Томского государственного университета*

Космический мусор в сочетании с потоком естественных частиц – метеороидов создает осколочно-метеороидную среду, представляющую реальную опасность для космических аппаратов (КА). Поэтому одной из задач отработки прочности конструкций ракетно-космической техники является обеспечение прочности при локальном высокоскоростном ударе механических частиц. Необходима также разработка перспективных средств защиты космических аппаратов на основе новых материалов и новых конструкций, которые позволят повысить живучесть КА, с приемлемыми весовыми и габаритными затратами. Для испытания новых конструкций и материалов необходимы средства высокоскоростного метания, позволяющие получать космические скорости в лабораторных условиях.

Анализ научно-технической и патентной литературы показывает, что из всех устройств высокоскоростного метания двухступенчатые легкогазовые установки (ЛГУ) в настоящее время являются одним из самых надежных и отработанных средств высокоскоростного метания в диапазоне скоростей 2,5...10км/с и выше. Причем, ввиду того, что ускорение метаемого элемента в ЛГУ производится легким газом на большой длине и при ограниченном максимальном давлении на дно поддона, обеспечивается сохранность метаемой сборки, а также точность наведения на определенный участок мишени. Особенностью их эксплуатации является ускорение метаемого элемента закреплённым в специальном поддоне, последующее отделение которого, в ряде случаев, является известной технической проблемой. Как правило, эта задача решается либо путём аэродинамического разделения, либо путём механического (силового) воздействия на поддон метаемой сборки. В экспериментах проведённых в НИИ ПММ ТГУ использовались два типа отсекаелей. В первом случае вынесенная за дульный срез ствола многослойная преграда с отверстием для пролета ударника, а во втором – надульный насадок, обеспечивающий полную отсечку фрагментов разрушенного поддона (Патент РФ №.2400687). Для ускорения ударников в виде шариков с формой «близкой к идеальной» использовался, разработанный в НИИ ПММ, способ свободного (без поддона) метания, когда шарик ускоряется в стволе непосредственно газовым потоком. Данный цикл исследований проведен в рамках сравнения эффективности защиты элементов космической техники различной конструкции [1].

ЛГУ также использовались при исследовании стойкости упрочняющих покрытий оптических элементов космической техники (иллюминаторов, солнечных батарей), разрабатываемых в ИФПМ СО РАН [2]. В данных экспериментах также использовался метод свободного метания порошка железа с размером частиц порядка 50 мкм. Разработан, запатентован (Патент РФ № 2610790) и введён в эксплуатацию стенд на базе легкогазовой установки и мишени для исследования взаимодействия мелких ударников с преградой. Предложенная мишень исключает засорение спутными частицами картины взаимодействия испытываемых образцов материала с мелкими ударниками (с характерными размерами меньше 1 мм). Конструкция мишени позволяет осуществлять взаимодействие с потоком ударников сразу нескольких исследуемых образцов, что позволяет добиться для них идентичности условий эксперимента и существенно сократить количество необходимых опытов. При проведении последней серии экспериментов стенд был доработан с целью измерения скорости ансамбля мелкодисперсных частиц. Для этого за дульным срезом ствола (в вакуумированной барокамере) устанавливается насадок, в котором выполнены два посадочных места для пьезоэлектрических датчиков давления. С помощью этих датчиков

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

фиксируется скорость головы струи газа. Оценки показывают, что для субмикронных частиц скорость, практически, совпадает со скоростью газа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 16-19-10264).

1. Gerasimov A.V., Dobritsa D.B., Pashkov S.V., Khristenko Y.F., “Theoretical and experimental study of a method for the protection of spacecraft from high-speed particles,” in *Cosmic Research*, 54(2) (2016), pp. 118-126.
2. Сергеев В.П., Калашников М.П., Воронов А.В., Свечкин В.П., Христенко Ю.Ф. Ионно-магнетронное формирование многослойных нанокompозитных покрытий на оптических элементах космических аппаратов // Сборник тезисов Международной конференции «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций». –21 - 25 сентября 2015. –Томск, Россия. –С.47 - 48.

DOI: 10.17223/9785946218412/238

ОСОБЕННОСТИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ТЕРМОШТАМПОВКИ ИЗДЕЛИЙ ИЗ ТЕРМОПЛАСТИЧНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Аношкин А.Н., Шипунов Г.С., Баранов М.А., Головин Д.В. и др.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

В настоящее время полимерные композиционные материалы широко распространены в различных отраслях промышленности, таких как: авиастроение, машиностроение, медицина и др. Область применения таких материалов существенно растёт с каждым годом. Так, например, гражданские самолёты авиастроительных компаний Boeing и Airbus состоят более чем на 50% из композиционных материалов, которые используются при изготовлении высоконагруженных узлов: элементов планера и двигателя. Тенденция использования инновационных материалов не обошла и отечественное авиастроение, в российском самолёте МС-21 и двигателе ПД-14 активно используются композиционные материалы.

Использование таких материалов позволяет снизить вес готовой детали, повысить экологические характеристики, а также увеличить экономичность самолёта. Зачастую при изготовлении деталей и узлов авиационной техники используются полимерные композиционные материалы (ПКМ), армированные однонаправленными или текстильными наполнителями на основе угольных или стеклянных волокон, в качестве связующего используется реактопластичные смолы. Физико-механические характеристики ПКМ хорошо изучены, а технологии изготовления достигли высокого уровня и позволяют автоматизировать часть процесса, что влечёт за собой высокую надёжность готовых деталей и снижение себестоимости.

Однако, не смотря на явные преимущества ПКМ на основе реактопластичного связующего, такие материалы имеют ряд недостатков, к которым можно отнести длительный процесс полимеризации. Данный процесс длится от 4 до 12 часов и требует использования энергоёмкого автоклавного оборудования, помимо этого, ПКМ на основе реактопластичного связующего имеют ограниченный срок хранения полуфабриката (препрега), а сам технологический процесс достаточно токсичен из-за испарений смол. Нивелировать эти недостатки позволяет использование так называемых термопластичных композиционных материалов (ТКМ). Кроме того, ТКМ обладают такими преимуществами как: повышенная трещиностойкость, ударостойкость, усталостная выносливость, способность к релаксации напряжений, возможность вторичной обработки. Стоит отметить, что в России на сегодняшний день отсутствуют промышленные технологии термопластичных композиционных материалов, вследствие этого исследования в данной области являются актуальными [1].

На данный момент существует четыре основных технологии изготовления деталей из ТКМ: прессование или литьё из дисперсно-армированных материалов, автоматизированная выкладка препрега и термоштамповка из листовых заготовок. Акцент в данной работе будет сделан на технологии термоштамповки ТКМ.

Для изготовления деталей и конструкций из ТКМ в НОЦ АКТ ПНИПУ была разработана «Опытная автоматизированная линия термоштамповки деталей из ТКМ», общий вид которой представлен на рисунке 1.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации



Рис. 1. Опытная автоматизированная линия термоштамповки ТКМ

В основе технологического процесса термоштамповки лежит предварительный нагрев заготовки из ТКМ, последующая транспортировка заготовки в пресс и непосредственное прессование [2]. Каждый из перечисленных этапов обладает набором характеристик, которые явным образом будут сказываться на качестве готовой детали. Так, процесс предварительного нагрева характеризуется скоростью нагрева, способом нагрева заготовки (возможен конвективный нагрев, либо смешанный за счёт конвективного и лучистого теплообмена с инфракрасными нагревательными элементами), максимальной температурой заготовки и т.д. Для второго этапа важную роль играет скорость транспортировки. Вследствие того, что транспортировка происходит при комнатной температуре, возникают большие теплотери, связанные с существенными температурными градиентами между окружающей средой и разогретой заготовкой. При проведении этапа прессования особое внимание необходимо уделить величине давления обработки и температуре, при которой происходит обработка, в силу строгих ограничений, накладываемых на диапазон температуры обработки [3].

В рамках работы рассмотрен технологический процесс термоштамповки, сформулированы критерии эффективности данного технологического процесса, разработан ряд требований к термопластичному материалу, режимам переработки термопластичных препрегов в изделия и параметрам технологического оборудования для изготовления конструкций из ТКМ.

В рамках данных исследований использовалось оборудование, входящее в состав уникальной научной установки «Исследовательский комплекс для проведения научно-технологических исследований в области создания изделий из полимерных композиционных материалов». Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 - 2020 годы» по теме: «Разработка опытных технологий автоматизированного изготовления деталей перспективных авиационных двигательных установок большой размерности из термопластичных композиционных материалов». Уникальный идентификатор прикладных научных исследований RFMEFI57717X0261.

1. Даутова А. Н., Янов В. В., Штейнберг Е. М., Зенитова Л. А. Разработка технологии получения полимерных композитов для изготовления медицинских инструментов // Вестник Казанского технологического университета. 2013. №17.
2. B.C. Meyer, Ch.V. Katsiropoulos, Sp.G. Pantelakis, Hot forming behavior of non-crimp fabric peek/c thermoplastic composites, Composite Structures, Volume 90, Issue 2, 2009, Pages 225-232
3. P. Harrison, R. Gomes, N. Curado-Correia, Press forming a 0/90 cross-ply advanced thermoplastic composite using the double-dome benchmark geometry, Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, Volume 54, 2013, Pages 56-69

DOI: 10.17223/9785946218412/239

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ И СВОЙСТВ УДАРОПРОЧНЫХ ЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ СИСТЕМЫ Zr-Y-O НА ПОДЛОЖКАХ Si

^{1,2}Божко И.А., ²Поданев А.П., ^{1,2}Калашников М.П., ^{1,2}Федорищева М.В., ^{1,2}Сергеев В.П.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский политехнический университет, Томск*

В связи с активным освоением космоса и необходимостью развития техники, способной работать в экстремальных условиях космического пространства в настоящее время актуальной задачей является разработка новых функциональных материалов и технологий их получения. В процессе эксплуатации космические аппараты (КА) подвергаются разрушающему воздействию различных факторов, в том числе столкновениям с микрометеороидами. При этом в наибольшей степени от ударов микрометеороидов страдают различные оптические элементы КА, такие как иллюминаторы, линзы, зеркала, фотоэлектрические преобразователи (ФЭП) солнечных батарей (СБ) и др. Очевидно, что микрочастицы при соударениях с КА не способны вызывать сквозное пробитие указанных элементов, но они способствуют деградации их поверхности. Это приводит к тому, что в процессе длительной эксплуатации КА происходит изменение оптических, электрических, механических и других характеристик оптических элементов [1], которые влияют на работоспособность КА в целом.

Солнечные батареи являются одним из важнейших элементов конструкции КА, так как в космосе они являются единственным источником выработки необходимого количества электроэнергии. В результате негативного воздействия факторов космического пространства, в том числе при воздействии потока высокоскоростных микрометеороидов, происходит нарушение структуры солнечных элементов, что влечет за собой снижение выработки электроэнергии. Одним из возможных способов защиты ФЭП СБ может быть использовано нанесение на их поверхность защитных покрытий, обладающих высокой стойкостью к ударным нагрузкам. В настоящей работе в качестве защиты стеклянных элементов КА от механических повреждений, возникающих при ударном воздействии высокоскоростных твердых частиц, предлагается использовать покрытия на основе Zr-Y-O, полученных методом импульсного магнетронного осаждения. Для прогнозирования ресурса работы указанных защитных покрытий при воздействии микрометеороидных частиц, требуется проведение ударных испытаний в лабораторных условиях, что по своей сути является новым и актуальным. В связи с этим целью данной работы являлось исследование микроструктуры, фазового состава, физико-механических свойств композиционных покрытий системы Zr-Y-O толщиной 3 мкм, полученных в условиях импульсного магнетронного осаждения, а также оценка их стойкости к ударному воздействию твердых микрочастиц железа, скорость которых лежит в интервале 5-7 км/с.

Осаждение покрытий системы Zr-Y-O осуществляли методом импульсного магнетронного осаждения на вакуумной установке УВН-05МД «КВАНТ» [2]. Питание магнетрона осуществлялось от импульсного биполярного источника питания частотой 50 кГц, мощность магнетрона достигала 1,2 кВт. Отношение парциальных давлений кислорода и аргона в вакуумной камере установки в процессе осаждения покрытий составляло 1:3. В качестве материала подложки использовали диски диаметром 15 мм и толщиной 4,5 мм из монокристаллического кремния с кристаллографической ориентацией [100]. В процессе магнетронного осаждения защитных покрытий подложку Si предварительно нагревали до $280 \pm 10^\circ\text{C}$ с помощью резистивного молибденового нагревателя мощностью 10 кВт. Температура подложек измерялась с помощью хромель-алюмелевой термопары. По данным гравиметрического метода было установлено, что полученные покрытия системы Zr-Y-O имеют толщину $3 \pm 0,5$ мкм.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Результаты исследования фазового состава полученных образцов методами рентгеноструктурного анализа и просвечивающей электронной микроскопии показали, что покрытие Zr-Y-O имеет ярко выраженную кристаллическую столбчатую структуру, которая формируется по всей толщине покрытия. При этом столбцы ориентированы перпендикулярно поверхности подложки. Фазовый состав формируемого покрытия на основе Zr-Y-O представлен диоксидом циркония ZrO_2 в моноклинной и тетрагональной модификациях.

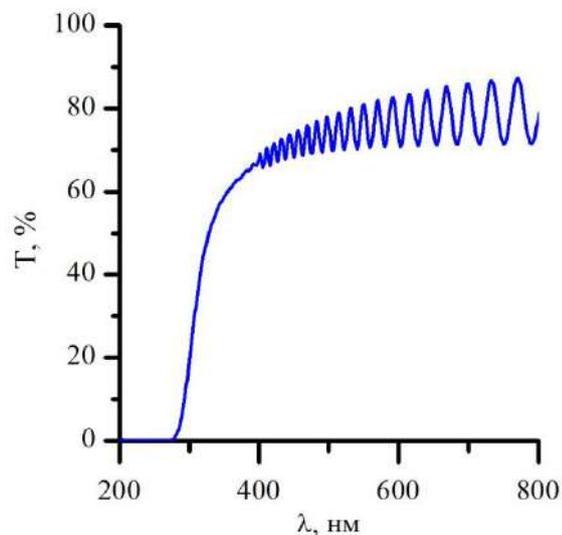


Рисунок 1 – Спектр светопропускания образца с покрытием системы Zr-Y-O

сопоставимо с нанотвердостью образцов исходного кремния, величина которой при нагрузке 20 мН составляет $11,5 \pm 0,4$ ГПа.

В результате ударно-волнового взаимодействия потока высокоскоростных микрочастиц железа [3] и исследуемых образцов на поверхности последних было обнаружено формирование кратеров различного размера. Результаты измерения размеров кратеров по СЭМ изображениям для исходного образца кремния показали, что большинство из них имеют размеры в интервале от 10 до 50 мкм. При переходе в сторону больших размеров наблюдается резкое снижение количества образующихся кратеров и в области 500–800 мкм наблюдается формирование единичных кратеров. Поверхностная плотность кратеров для образцов кремния без покрытия составила $10,85 \text{ мм}^{-1}$. После нанесения защитных покрытий системы Zr-Y-O толщиной 3 мкм на образцы кремния поверхностная плотность кратеров составила $2,94 \text{ мм}^{-1}$, что в 3,7 раза меньше по сравнению с исходными образцами. Это происходит за счет того, что защитные покрытия системы Zr-Y-O предотвращают образование на поверхности исследуемых образцов кратеров с размерами менее 30 мкм, а доля кратеров с размером от 30 до 50 мкм составляет менее 5 %.

1. Модель космоса: Научно-информационное издание: В 2 т. / Под ред. М.И. Панасюка, Л.С. Новикова. – Т. 2: Воздействие космической среды на материалы и оборудование космических аппаратов. – М.: КДУ, 2007. – 1144 с.
2. Сергеев В.П., Яновский В.П., Параев Ю.Н. и др. Установка ионно-магнетронного напыления нанокристаллических покрытий (КВАНТ) // Физическая мезомеханика. 2004. Т. 7. № Спец2. С. 333-336.
3. Стенд для исследования высокоскоростного соударения мелких частиц с преградой МПК F41F1/00: патент Рос. Федерация № 2610790; заявл. 23.10.2015; опубл. 15.02.2017, Бюл. № - 5.

DOI: 10.17223/9785946218412/240

ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМИРОВАННОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181 ПОСЛЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

^{1,2}Алмаева К.В., ^{1,2}Полехина Н.А., ^{1,2}Литовченко И.Ю.

^{1,2}Тюменцев А.Н., ³Чернов В.М., ³Леонтьева-Смирнова М.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

³*АО «ВНИИНМ им. академика А.А. Бочвара», Москва*

Жаропрочные 12 %-ные хромистые ферритно-мартенситные стали рассматриваются как перспективные конструкционные материалы для использования в активных зонах ядерных и термоядерных реакторов нового поколения. С целью расширения интервала рабочих температур сталей данного класса необходимо повышение их высокотемпературной прочности при сохранении достаточного запаса низкотемпературной пластичности. Указанные задачи решаются с помощью модификации микроструктуры сталей путем термических и термомеханических обработок.

В [1, 2] показаны возможности модификации микроструктуры ферритно-мартенситных сталей с помощью высокотемпературных термомеханических обработок (ВТМО), включающих пластическую деформацию в аустенитной области. ВТМО приводит к повышению эффективности дисперсного и субструктурного упрочнения за счет увеличения плотности дислокаций и объемной доли наноразмерных частиц карбонитридных фаз. Указанная модификация микроструктуры обеспечивает повышение прочностных свойств ферритно-мартенситных сталей относительно состояний, полученных в результате традиционных термических обработок (ТТО), состоящих из нормализации и высокого отпуска (720 °С, 3 ч.). Особенности пластической деформации этих сталей при различных, в том числе близких к рабочим (650 – 720 °С), температурах остаются недостаточно изученными.

Представлены результаты исследований механических свойств ферритно-мартенситной стали ЭК-181 (Fe–12Cr–1,1W–0,25V–0,08Ta–0,006B–0,15C–0,04N), деформированной растяжением при T = 20, 650 и 720 °С и особенностей деформированной микроструктуры образцов вблизи шейки после ВТМО. Обработка состояла из аустенизации с нагревом T = 1100 °С, 1 ч., горячей пластической деформации прокаткой до величины $\varepsilon \approx 50\%$ с последующей закалкой в воду. После деформации проводили отпуск при T = 720 °С, 1 ч.

Механические испытания осуществляли методом активного растяжения при T = 20 °С, и 650 °С и 720 °С в вакууме. Структурные исследования проводили с помощью просвечивающего электронного микроскопа Philips CM12 при ускоряющем напряжении 120 кВ. Тонкие фольги для микроскопии были подготовлены из области вблизи шейки с использованием фокусированной ионно-лучевой системы Hitachi FB-2100.

Испытания на растяжение показали, что при изученных температурах пределы текучести и прочности стали ЭК-181 после ВТМО превышают соответствующие значения после ТТО [2] на ≈ 180 МПа при 20 °С и 80-110 МПа при 650 °С и 720 °С. Увеличение прочности стали в условиях ВТМО связано с повышением эффективности дисперсного упрочнения наноразмерными частицами V(C, N) и субструктурного упрочнения за счет повышения плотности дислокаций. Величина относительного удлинения после ВТМО на $\approx 1.5-4\%$ ниже, чем в случае ТТО.

Исследования особенностей микроструктуры стали вблизи области шейки после растяжения при 20 °С показали, что в процессе пластической деформации мартенситные ламели испытывают изгиб и фрагментацию с образованием новых малоугловых границ.

Пластическая деформация вблизи интервала рабочих температур (650 - 720°С) приводит к развитию динамической полигонизации, рекристаллизации и изменениям в карбидной подсистеме. При этом исходные вытянутые мартенситные ламели трансформируются в более равноосные фрагменты с мало- и высокоугловыми границами разориентации. В отдельных

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

фрагментах наблюдается высокая плотность дислокаций, которые закреплены мелкодисперсными частицами V(C, N). Размеры грубодисперсных частиц $M_{23}C_6$ в области шейки увеличиваются по сравнению с таковыми в недеформированном состоянии. Размер большинства зерен или фрагментов не превышает 500 нм, что меньше, чем в случае деформированной структуры после ТТО (400 – 800 нм), плотность наноразмерных частиц V(C, N) после ВТМО значительно больше, чем после ТТО.

Повышенная плотность дислокаций и наноразмерных частиц V(C, N), сформированных в условиях ВТМО, препятствует развитию пластической деформации, в том числе при температурах 650 и 720 °С. При этом процессы динамической полигонизации и рекристаллизации развиваются менее интенсивно, чем после ТТО. Это приводит к меньшим средним размерам фрагментов или зерен вблизи области шейки деформированных образцов. Указанные структурные особенности обеспечивают повышенный уровень прочностных свойств стали после ВТМО и меньшие значения относительного удлинения при изученных температурах.

1. Almaeva K.V., Polekhina N.A., Litovchenko I.Yu. A comparative investigation of mechanical properties of the ferritic-martensitic steel EK-181 in the temperature range 700-800 °C after high-temperature thermomechanical and traditional heat treatments // AIP Conference Proceedings. – 2018. – PP. 020009-1–020009-4.
2. Polekhina N.A., Litovchenko I.Y., Tyumentsev A.N., Kravchenko D.A., Chernov V.M., Leontyeva-Smirnova M.V. Effect of High-Temperature Thermomechanical Treatment in the Austenite Region on Microstructure and Mechanical Properties of Low-Activated 12% Chromium Ferritic-Martensitic Steel EK-181 // Technical Physics. 2017. Vol. 62, № 5. P. 736-740.

DOI: 10.17223/9785946218412/241

**ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭП-823 ПОСЛЕ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ**

^{1,2}Алмаева К.В., ²Линник В.В., ^{1,2}Литовченко И.Ю., ^{1,2}Полехина Н.А.

^{1,2}Тюменцев А.Н., ³Чернов В.М., ³Леонтьева-Смирнова М.В.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

³АО «ВНИИНМ им. академика А.А. Бочвара», Москва

Изучено влияние высокотемпературной термомеханической обработки (ВТМО) с деформацией в аустенитной области на структурно-фазовое состояние и механические свойства реакторной ферритно-мартенситной 12 %-ной хромистой стали ЭП-823 (Fe-12Cr-Mo-W-Si-V-W-Nb).

ВТМО включала в себя нагрев до температуры 1100 °С с выдержкой 1 ч., горячую пластическую деформацию прокаткой до величины $\epsilon \approx 50\%$ за один проход (прокатный стан находился при комнатной температуре; температура образца на выходе из стана – не ниже 650 °С) и последующую закалку в воду. После ВТМО проводили отпуск при $T = 720$ °С в течение 1 ч. Традиционная термическая обработка (ТТО) для сталей такого класса состоит из нормализации от $T = 1100$ °С, 1 ч. и отпуска при $T = 720$ °С (3 ч).

Электронно-микроскопические исследования показали, что после ВТМО микроструктура стали представлена ламелями мартенсита шириной около 500 нм и ферритными зёрнами субмикронного масштаба. В ферритно-мартенситной структуре обнаружены наноразмерные частицы карбонитрида типа MX (M – V, Nb, X – C, N) диаметром до 20 нм. Помимо указанных частиц наблюдаются грубодисперсные выделения карбидов $M_{23}C_6$, имеющие размеры до 200 нм и располагающие преимущественно внутри мартенситных пластин и зёрен феррита.

Сравнительные исследования микроструктуры стали ЭП-823 после ТТО и ВТМО показали, что основные различия между обработками заключаются, во-первых, в уменьшении в результате ВТМО плотности частиц $M_{23}C_6$; во-вторых, в повышении плотности дислокаций, в третьих, в увеличении объёмной доли и дисперсности частиц V (C, N). Кроме того важно отметить, что в режиме ВТМО образование частиц MX происходит в аустенитной фазе в процессе пластической деформации и охлаждения из аустенитной области, в то время как при ТТО они формируются в процессе отпуска при 720 °С.

Исследование кратковременных механических свойств стали ЭП-823 показало, что при комнатной температуре испытаний ВТМО приводит к значительному ($\Delta\sigma_{0,1} \leq 253$ МПа) увеличению предела текучести, по сравнению с ТТО (таблица). При повышенной температуре испытаний ($T = 650$ °С) эффекты упрочнения менее значительны (≤ 74 МПа). Величина относительного удлинения до разрушения при этом сохраняется на достаточно высоком уровне (не ниже 8 %, таблица).

Таблица – Механические свойства стали ЭП-823 после ВТМО и ТТО.

Режим обработки	Температура испытаний			
	T = 20 °C		T = 650 °C	
	$\sigma_{0,1}$, МПа	δ , %	$\sigma_{0,1}$, МПа	δ , %
ТТО	650 – 734	12.8 – 13.1	296 – 347	9.7 – 11.7
ВТМО	856 – 903	8 – 10	345 – 370	13.5 – 16.7

Таким образом, сформированная в результате ВТМО гетерофазная структура с высокой дисперсностью наноразмерных частиц типа MX и повышенной плотностью дислокаций за счет повышения эффективности совместного дисперсного и субструктурного упрочнения обеспечивает значительное увеличение, по сравнению с ТТО, предела текучести стали ЭП-823 как при комнатной температуре испытаний, так и в интервале предполагаемых рабочих температур ($T = 650$ °С) активной зоны реактора.

DOI: 10.17223/9785946218412/242

**ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИОННО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА
КОРРОЗИОННЫЕ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА Ti-15Mo/TiB**

Озеров М.С., Газизова М.Ю., Степанов Н.Д., Жеребцов С.В.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород

К настоящему моменту достигнуто достаточное понимание того, как выбор упрочняющих компонентов металл-матричных композитов и их количества влияет на их структуру и свойства, а также доказаны возможности практического использования таких материалов. В то же время композиты на основании альфа титана не удовлетворяют всем требованиям предъявляемым промышленностью для ряда применений. Для повышения свойств композитов на основе титана и его сплавов в качестве матрицы могут использоваться бета сплавы. Обладая основными достоинствами технически чистого титана (высокие коррозионные свойства, биосовместимость, высокая удельная прочность), бета сплавы титана имеют более высокую пластичность, возможность упрочнения посредством термической обработки до уровня, существенно превосходящего прочность технически чистого титана. Одним из возможных кандидатов является псевдо бета сплав Ti-15%Mo. Этот сплав сертифицирован для применений в ортопедии, травматологии, сердечно-сосудистой хирургии (ASTM F2066), благодаря хорошей биосовместимости и очень низкому модулю упругости. К сожалению, имеющиеся возможности управления структурой часто оказывают разнонаправленное воздействие на свойства данного сплава. Например, необходимый для использования в качестве имплантатов низкий модуль упругости резко повышается после термического упрочнения, а без термообработки прочность сплава недостаточно высока. Это ограничивает возможности практического применения данного сплава. Одним из решений данной проблемы могло бы стать упрочнение бета титановой матрицы волокнами TiB. В данной работе получение композита Ti-15%Mo/TiB реализовано искровым плазменным спеканием. Важным достоинством данного метода является возможность сохранения дисперсной структуры порошка и получения наноструктурного состояния в объемных заготовках композита. С целью определения влияния армирующего компонента TiB₂ на коррозионную стойкость и износостойкость композита в данной работе были проведены исследования трибологических и коррозионных свойств композита Ti-15Mo/TiB, также определено влияние деформационно-термической обработки на изменение данных свойств. Следует отметить, что работ о закономерностях изменения свойств композитных материалов, подвергнутых термомеханической обработке, крайне мало в литературе.

Композит Ti-15Mo/TiB был получен искровым плазменным спеканием (ИПС) смеси порошков 80.75 вес.% Ti, 14.25 вес.% Mo и 5 вес.% TiB₂ при температуре 1400°C. По данным сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) композит в спеченном состоянии показывает довольно высокую макроскопическую однородность и состоит из титановой матрицы с распределенными в ней волокнами TiB и небольшого количества непрореагировавших частиц TiB₂ (Рис. 1). Средний размер поперечного сечения волокон TiB составляет 130 нм, однако встречаются и более толстые волокна размером до 1-2 мкм.

Анализ с использованием просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) показывает в целом довольно высокую плотность дислокаций в структуре, однако в некоторых областях можно хорошо видеть отдельные волокна TiB, расстояние между которыми составляет 1-1,5 мкм (Рис. 2). С целью повышения однородности исходное состояние композита было подвергнуто гомогенизационному отжигу при 1200°C в течение 24 часов. Благодаря отжигу наблюдается некоторое выравнивание микроструктуры и приближение к номинальным значениям химического состава композита.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

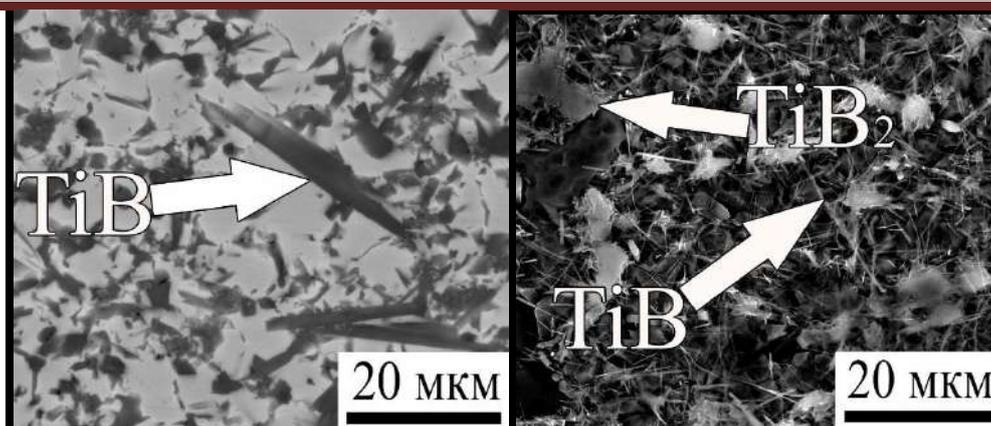


Рис. 1. СЭМ изображения (а - структура без травления, б – структура после травления) микроструктуры композита Ti-15Mo/TiB



Рис. 2. ПЭМ изображение микроструктуры композита Ti-15Mo/TiB

Для повышения механических свойств композита была проведена всесторонняя изотермическая ковка (ВИК) при $T=700^{\circ}\text{C}$. Показано, что в ходе деформации в титановой матрице развивается динамическая рекристаллизация. Деформация приводит к некоторому снижению микротвердости и сопротивлению износа. Твердость композита на 40-60% выше, чем у технически чистого титана VT1-0. После ВИК твердость композита уменьшается на ~15%. Сопротивление износу образцов композита в исходном и деформированном состояниях сравнивали со свойствами технически чистого титана VT1-0. Испытания на износ показали увеличение коэффициента трения композита Ti-15Mo/TiB по сравнению с чистым титаном. Показано, что ВИК не меняет существенно трибологические характеристики. Исследования коррозионной стойкости проводилось электрохимическим методом с использованием потенциостата IPC-Pro и стандартной трех-электродной ячейке в растворе Рингера (0,9-% водный раствор NaCl) при комнатной температуре. Исследование электрохимической коррозии свидетельствует о сравнимых характеристиках композита и чистого титана. Полученные данные согласуются с результатами недавних работ [1, 2] в которых также показаны сопоставимые коррозионные характеристики композита Ti/TiB по сравнению с технически чистым титаном.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФ №15-19-00165.

1. Chen, Y. Corrosion Behaviour of Selective Laser Melted Ti-TiB Biocomposite in Simulated Body Fluid / Y. Chen, J. Zhang, N. Dai, P. Qin, H. Attar, L.-C. Zhang // *Electrochimica Acta*. 2017. V. 232. P. 89-97.
2. Sivakumar, B. Corrosion behavior of titanium boride composite coating fabricated on commercially pure titanium in Ringer's solution for bioimplant applications / B. Sivakumar, R. Singh, L.C. Pathak // *Mater. Sci. Eng. C*. 2015. V. 48. P. 243–255.

DOI: 10.17223/9785946218412/243

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ МОДУЛЕЙ УПРУГОСТИ НАНОЧАСТИЦ ИСПОЛЬЗУЯ МОДЕЛИ ГОМОГЕНИЗАЦИИ

Филиппов А.А., Фомин В.М.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия

Анализ современной литературы позволяет сделать простой вывод, что при изменении характерного размера наноматериалов их характеристики могут изменяться на порядки [1,2]. Экспериментальные методы определения механических характеристик наноматериалов представляют технически сложную и реально пока невыполнимую задачу, вследствие малости размеров данных объектов [3]. Расчетные модели дают достаточно большие расхождения в связи с неточными заложенными в них исходными начальными данными [4].

В данной работе на основе теоретико-экспериментального подхода удается получить свойства наноструктур в зависимости от размеров и структуры их образования. Гетерогенный материал, состоящий из нанофазы и связующей фазы, массовые и объемные концентрации которых заданы, с помощью методов осреднения сводится к гомогенному. Такой подход связывает механические характеристики фаз через осредненные свойства [5]. Полученный гомогенный материал позволяет получать образцы для классических экспериментов на растяжение, сжатие, кручение и др. При этом в осредненные механические характеристики материала будут входить механические характеристики составляющих фаз. Считая механические характеристики связующего материала и осредненные характеристики гомогенного материала известными из данных экспериментов, получим систему уравнений для определения механических характеристик нанофаз, входящих в данный гомогенный образец. Изменяя размеры нанофаз и, проводя соответствующие расчеты и эксперименты, получим закономерность изменения механических характеристик для нанофазы.

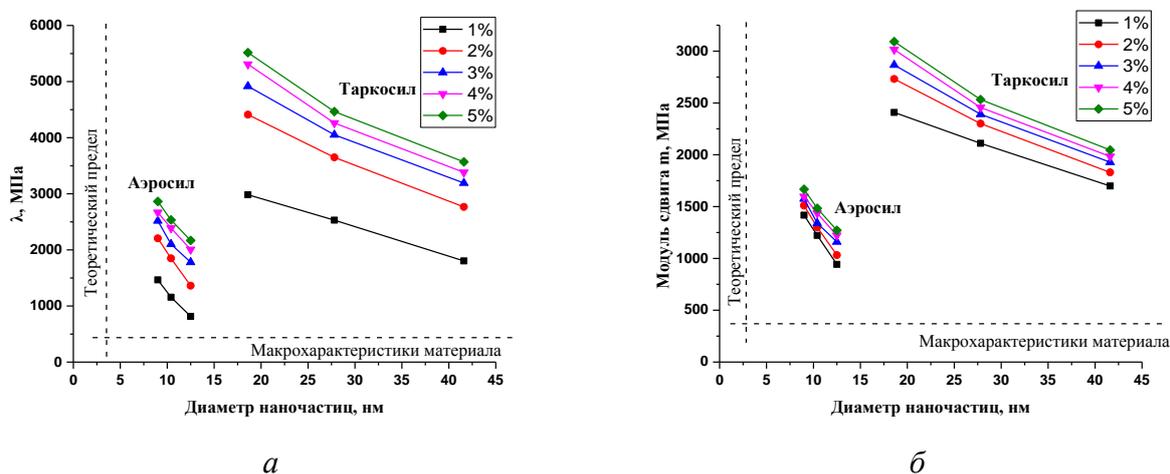


Рис. 1 Параметры Ламэ, рассчитанные для наночастиц диоксида кремния в зависимости от среднего размера при различных объемных концентрациях наполнителя: (а) – параметр λ , (б) – модуль сдвига

Используя предложенный подход, были исследованы упругие характеристики наночастиц диоксида кремния порошков Аэросил и Таркосил в зависимости от диаметров. В результате осреднения по объему и в приближении одноосного напряженного и деформированного состояния удастся получить систему алгебраических уравнений, связывающих:

$$\lambda_1 = \varphi_1(\lambda_2, \mu_2, \hat{\lambda}, \hat{\mu}, m_1, d_1); \quad \mu_1 = \varphi_1(\lambda_2, \mu_2, \hat{\lambda}, \hat{\mu}, m_1, d_1) \quad (1)$$

где λ_1, μ_1 константы Ламэ для нанофазы, $\lambda_2, \mu_2, \hat{\lambda}, \hat{\mu}$ константы Ламэ связующей и осредненной фаз соответственно, m_1 объемная концентрация и d_1 - диаметр нанофазы. Проведя

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

эксперименты на растяжение и сжатие в одноосном напряженном приближении, находим $\hat{\lambda}, \hat{\mu}$ при заданных m_1, d_1 , чем и замыкается система (1). Подготовка полимерного композиционного материала подробно описана в [6], а результаты механических испытаний изложены также в работе [7].

В результате приведенных исследований установлено, что при увеличении d_1 параметры λ_1, μ_1 асимптотически стремятся к классическому сплошному материалу, а при уменьшении d_1 параметры λ_1, μ_1 возрастают, стремясь к теоретическому пределу, вычисленному в приближении двухатомной структуры. Следует заметить, что данные результаты подтверждают выводы Н.Ф. Морозова, А.М. Кривцова и др., полученные на основе теоретических исследований [8,9].

1. J. Moczó, B. Pukanszky // *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. 2008. № 14 p. 535–563.
2. Ni Q.-Q Fu Y Iwamoto // *Journal of the Society of Material Science*. 2004. № 53(9). p. 956-961.
3. A. Taloni, M. Vodret, G. Costantini, S. Zapperi // *Nature Reviews: Materials*. 2018. № 3. p.211-224.
4. A. V. Vakhrushev, A. Y. Fedotov, A. A. Vakhrushev, V. B. Golubchikov // *Journal of Mathematics and Computations in Simulation*. 2016. p.192-201.
5. S. Torquato, C. L. Y. Yeong, M. D. Rintoul, D. L. Milius, I. A. Aksay // *Journal of American Ceramic Society*. 1999. № 82(5). p. 1263-1268.
6. Т. А. Brusentseva, А. А. Filippov, V. M. Fomin, E. V. Malykhin, T. A. Vaganova // *Nanotechnologies in Russia*. 2014. № 9(11-12). p.638-644.
7. Т. А. Brusentseva, А. А. Filippov, V. M. Fomin, S.V. Smirnov, I. A. Veretennikova // *Mechanics of Composite Materials*. 2015. № 4(51). P. 531-538.
8. В. А. Еремеев, Е. А. Иванова, Н. Ф. Морозов // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Математика. Механика. Информатика*. 2008, № 3(8). с. 25–32.
9. V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov, E. A. Podolskaya, M. L. Kachanov // *Philosophical Magazine*. 2016. № 15(96). p. 1538-1555.

DOI: 10.17223/9785946218412/244

**ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ ОБЪЕМА И ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА
ПОВЕРХНОСТИ ФЕРРИТНО-МАРТЕНСИТНОЙ СТАЛИ ЭК-181 ПОСЛЕ
ДЛИТЕЛЬНОЙ ВЫДЕРЖКИ В ТЕПЛОНОСИТЕЛЕ**

^{1,2}Литовченко И.Ю., ^{1,2}Алмаева К.В., ^{1,2}Полехина Н.А., ^{1,2}Пинжин Ю.П.,
^{1,2}Тюменцев А.Н., ³Чернов В.М., ³Леонтьева-Смирнова М.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

³*АО «ВНИИНМ им. академика А.А. Бочвара», Москва*

Ферритно-мартенситные стали в настоящее время рассматриваются для использования в качестве конструкционных материалов активных зон ядерных и термоядерных реакторов нового поколения, в том числе для реакторов со свинцовым теплоносителем. Для этих материалов необходимо исследование стабильности структурно-фазового состояния и коррозионной стойкости в условиях длительного контакта с теплоносителем при рабочих температурах.

Методами просвечивающей электронной микроскопии изучено влияние длительной выдержки 3000 ч при 600 °С в свинцовом теплоносителе на структурно-фазовое состояние объема цилиндрических образцов малоактивируемой российской ферритно-мартенситной стали ЭК-181 (Fe–12Cr–1,1W–0,25V–0,08Ta–0,006B–0,15C–0,04N) в сравнении с состоянием после традиционной термической обработки. Показано, что ферритно-мартенситная структура после длительной выдержки в свинцовом теплоносителе сохраняет свою стабильность. Обнаружено повышение плотности и некоторое увеличение размеров частиц вторых фаз – грубодисперсных $M_{23}C_6$ и наноразмерных $V(CN)$.

Методами растровой электронной микроскопии изучена фрактография цилиндрических образцов, диаметром 3 мм, растянутых при температурах 20, 680, 700 и 720 °С после выдержки в теплоносителе в сравнении с образцами без выдержки. Показано, что при повышенных температурах разрушение имеет вязкий характер с чашечным изломом. При 20 °С, помимо чашечного излома наблюдаются отдельные элементы скола и трещины, проходящие через весь разрушенный образец. При повышенных температурах наблюдается значительный (в несколько раз) рост сужения в шейке по сравнению с деформацией при 20 °С, который коррелирует с увеличением относительного удлинения. Длительная выдержка в теплоносителе не изменяет характер разрушения образцов при указанных температурах.

Исследования изменения элементного состава на поперечных шлифах выявили формирование «рыхлого» неоднородного слоя толщиной (10 – 25) мкм на поверхности цилиндрических образцов после выдержки в свинцовом теплоносителе. В этом слое содержание таких элементов как Fe и Cr отличается от основного объема материала. Также в нем повышено содержание кислорода и наблюдаются следы Pb. Предполагается, что поверхностный слой представлен оксидными пленками на основе окислов железа и хрома. Под поверхностным слоем на глубине до 10 мкм обнаружено незначительное повышение содержания кислорода.

Таким образом, изменения в структурно-фазовом состоянии объема материала (на расстояниях > 100 мкм от поверхности) после длительной выдержки в свинцовом теплоносителе затрагивают только карбидную подсистему, ферритно-мартенситная структура при этом сохраняется. На поверхности возможно формирование тонких неоднородных оксидных пленок со следами Pb. Указанные структурные трансформации не влияют на характер разрушения стали при изученных температурах.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-48-700020 и Администрации Томской области.

DOI: 10.17223/9785946218412/245

ВЛИЯНИЕ БИМОДАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛУЧЕННОЙ РАВНОКАНАЛЬНЫМ УГЛОВЫМ ПРЕССОВАНИЕМ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ПРОКАТКОЙ НА СВЕРХПЛАСТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ Al-Mg-Sc-Zr СПЛАВА

Автократова Е.В., Латыпова О.Э., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа

Исследовали влияние равноканального углового прессования (РКУП) и последующей изотермической прокатки на микроструктуру и сверхпластическое поведение алюминиевого сплава 1570С системы Al-Mg-Sc-Zr. Слиток, гомогенизированный при температуре 360°C в течение 6 часов, деформировали РКУП при температуре 325°C до степени деформации 3, затем прокатывали по двум режимам: при температуре 325°C до суммарной степени обжатия 85% (теплая прокатка) и при комнатной температуре до 80% (холодная прокатка). Микроструктуру сплава анализировали методами растровой и просвечивающей электронной микроскопии. Сверхпластическое поведение изучали в интервале температур 350-520°C и скоростей деформации 10^{-3} - 10^{-1} с⁻¹.

Обнаружено, что равноосная зеренная структура гомогенизированного слитка со средним размером зерна 25 мкм трансформировалась в процессе РКУП в смешанную структуру, состоящую на 30% из равноосных ультрамелких зерен размером около 2 мкм, расположенных вдоль границ вытянутых фрагментов исходных зерен с развитой субструктурой и с размером субзерен около 1 мкм. Доля малоугловых границ в такой структуре составила около 60%. Последующая теплая прокатка приводила к дополнительному вытягиванию крупных зерен, незначительному увеличению доли ультрамелких зерен и уменьшению их размера. Угловые характеристики структуры при этом практически не изменялись. При холодной же прокатке бимодальная структура, сформированная РКУП, замещалась сильнодеформированной структурой с долей малоугловых границ около 70%, содержащей высокую плотность решеточных дислокаций и ячейки размером 0,2-0,5 мкм.

Все полученные структурные состояния сплава обеспечили достижение как высокоскоростной, так и низкотемпературной сверхпластичности с высокими значениями удлинений до разрушения (δ) и коэффициента скоростной чувствительности (m). Так сплав после РКУП продемонстрировал δ до 2800% с коэффициентом $m \geq 0,45$ при скорости деформации $1,4 \times 10^{-2}$ с⁻¹ в интервале температур 500-520°C, а при $T=350^\circ\text{C}$ - $\delta = 400\%$ при коэффициенте $m > 0,35$. После теплой прокатки сплав показал еще более высокий уровень свойств: при 500°C и скорости деформации $5,6 \times 10^{-2}$ с⁻¹ удлинения достигали 3030% при $m = 0,45$. В результате холодной прокатки сплав продемонстрировал те же значения максимальных удлинений и коэффициента m при 520°C и скорости деформации $1,4 \times 10^{-2}$ с⁻¹.

Анализ микроструктуры после статического отжига (в области захватов образцов) показал, что независимо от температуры испытаний она оставалась бимодальной и содержала во всех состояниях сплава крупные зерна с развитой субструктурой, окруженные мелкими зернами. В процессе динамического отжига структура (в рабочей части) образцов, показавших наибольшие удлинения, постепенно трансформировалась в равноосную мелкозернистую структуру с размером зерна 8-10 мкм и логнормальным распределением зерен по размерам. При этом после растяжения вне оптимальных температурно-скоростных условий и после сравнительно малых степеней деформации микроструктура сплава оставалась неоднородной, что может отрицательно сказаться на комплексе служебных свойств готовых изделий. Последнее необходимо учитывать при разработке режимов промышленных процессов формовки.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ по госзаданию ИПСМ РАН № АААА-А19-119021390107-8.

DOI: 10.17223/9785946218412/246

МИКРОСТРУКТУРА, СТАТИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ И СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С, ПОДВЕРГНУТОГО ВСЕСТОРОННЕЙ КОВКЕ С ПОНИЖЕНИЕМ ТЕМПЕРАТУРЫ

Ситдиков О.Ш., Автократова Е.В., Ильясов Р.Р., Латыпова О.Э., Маркушев М.В.
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа

Исследовали влияние всестороннейковки (ВК) с понижением температуры на структуру и механические свойства литого сплава 1570С (Al-5Mg-0,18Mn-0,2Sc-0,02Zr (вес. %)). Ковку проводили на крупнозернистых (с размером зерна 25 мкм) заготовках Ø80x150 мм за три этапа: I - при температуре 325°C до суммарной степени деформации $\epsilon = 12$, II - при 250°C до $\epsilon = 18$, III - при 175°C до $\epsilon = 24$. Показано, что уже после первого этапа формировалась однородная мелкозернистая структура со средним размером и объемной долей мелких зерен 2 мкм и 80%, а после третьего - однородная (ультра)мелкозернистая структура с размером зерен 1 мкм и их долей 95%, соответственно.

Обнаружено, что после I этапа ВК, несмотря на измельчение зерен на порядок, прочность сплава сохранялась на уровне гомогенизированного слитка на фоне значительного повышения его пластичности. Отсутствие значимого упрочнения было связано с тем, что упрочняющий эффект от измельчения зерен компенсировался разупрочнением, вызванным изменением морфологии дисперсных выделений $Al_3(Sc,Zr)$. После трех этапов ВК прирост твердости сплава составил около 15%, предела текучести - 30%, предела прочности - 11% и сопровождался сохранением достаточно высоких показателей пластичности при комнатной температуре.

Оценка термической стабильности микроструктуры сплава после ВК показала, что полученные структурные состояния стабильны после часовых отжигов вплоть до 400°C. При этом более равновесная и менее дисперсная структура, полученная после I этапа ВК, демонстрировала большую стабильность, чем более нагартованная и дисперсная структура после III этапа. Отличительной особенностью последней являлась подверженность аномальному росту зерен, приводившая к формированию бимодальной структуры уже при отжиге при 425°C, содержащей области как крупных, так и (ультра)мелких зерен. Рост зерен сопровождался резким падением твердости сплава.

Обнаружено, что сплав после I этапа ВК демонстрировал уникальную высокоскоростную сверхпластичность в интервале температур 400-500°C с удлинениями $\geq 500\%$. Наибольшие значения удлинения (до 2850%) и коэффициента скоростной чувствительности m (0,4-0,6) были зафиксированы при скорости деформации $1 \times 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ и температуре испытаний 500°C, а также при $6 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ и 450°C. При понижении температуры ВК характеристики сверхпластичности сплава снижались вследствие увеличения плотности дислокаций (дислокационных границ) и снижения стабильности структуры. В результате, после третьего этапа ВК температурно-скоростной диапазон сверхпластичности сплава заметно сужался: высокоскоростная сверхпластичность с удлинениями до 1700% с $m \leq 0,4$ была достигнута лишь в интервале скоростей деформации $1,4 \times 10^{-2} - 5,6 \times 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ при 350 - 400°C. При этом при 350°C в интервале скоростей деформации $5 \times 10^{-3} - 1 \times 10^{-1} \text{ с}^{-1}$ наблюдали сверхпластичное поведение с удлинениями $> 800\%$, которое можно отнести к низкотемпературной сверхпластичности.

Сделан вывод о том, что ВК с понижением температуры является эффективным методом обработки, позволяющим получать массивные заготовки из сплава 1570С с уникальным сочетанием параметров статической прочности при комнатной температуре, и высокоскоростной и низкотемпературной сверхпластичности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 16-19-10152-П) (проведение ВК, анализ структуры и механических свойств) и Министерства науки и высшего образования РФ по госзаданию ИПСМ РАН № АААА-А19-119021390107-8 (анализ сверхпластичности).

DOI: 10.17223/9785946218412/247

**ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ ЭК-164 В УСЛОВИЯХ
ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ОБРАБОТОК**

^{1,2}Аккузин С.А., ^{1,2}Литовченко И.Ю., ^{1,2}Тюменцев А.Н.

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Методами просвечивающей электронной микроскопии исследованы особенности дефектной микроструктуры аустенитной стали ЭК-164 после двух термомеханических обработок: теплой деформации прокаткой ($\varepsilon \approx 60\%$) при $600\text{ }^\circ\text{C}$ за несколько проходов, и последовательности из теплой (при $600\text{ }^\circ\text{C}$, $\varepsilon \approx 50\%$) и низкотемпературной деформации ($\varepsilon \approx 15\%$). Низкотемпературную деформацию осуществляли с предварительным охлаждением в жидком азоте. Изучены механические свойства стали после указанных обработок в процессе испытаний на растяжение при комнатной температуре.

Электронно-микроскопические исследования показали, что в процессе теплой деформации аустенитные зерна размерами $30 - 40\text{ мкм}$ фрагментируются с формированием пластин субмикронного размера. Между пластинами наблюдаются как мало-, так и высокоугловые границы разориентации, плотность дислокаций в объеме пластин повышена по сравнению с исходным состоянием.

Термомеханическая обработка, состоящая из теплой и последующей низкотемпературной деформации, приводит к дополнительным изменениям в микроструктуре стали. В процессе теплой деформации ($\varepsilon \approx 50\%$) формируется неоднородная фрагментированная структура с пластинами шириной $\approx 1 - 2\text{ мкм}$. При этом фрагментация развивается в локализованных участках отдельных аустенитных зерен. В процессе последующей низкотемпературной деформации в указанной структуре развивается интенсивное механическое двойникование [1]. Во фрагментированной структуре двойникование развивается преимущественно по одной системе $\{111\}$, в отсутствие фрагментации – по нескольким системам. В отдельных микродвойниках обнаружено вторичное двойникование с формированием нанодвойников размерами $\approx 25\text{ нм}$ в ширину.

Испытания на растяжение показали, что теплая деформация при $600\text{ }^\circ\text{C}$, $\varepsilon \approx 60\%$ обеспечивает повышение прочностных свойств стали: предел текучести $\approx 700\text{ МПа}$, предел прочности $\approx 800\text{ МПа}$ и относительное удлинение $\approx 6.7\%$. Термомеханическая обработка, состоящая из теплой и последующей низкотемпературной деформации, способствуют дополнительному упрочнению: предел текучести $\approx 840\text{ МПа}$, предел прочности $\approx 1050\text{ МПа}$. При этом относительное удлинение снижается до $\approx 5.5\%$. Указанные прочностные свойства стали превышают исходные значения $\approx 3 - 4$ раза.

Таким образом, теплая пластическая деформация при $600\text{ }^\circ\text{C}$ приводит к формированию фрагментированной микроструктуры, состоящей из пластин субмикрокристаллического масштаба. Дополнительная низкотемпературная деформация (после теплой) способствует развитию интенсивного механического двойникования, в том числе во фрагментированной структуре. Указанные особенности микроструктуры обеспечивают высокие значения пределов текучести и прочности стали, с сохранением значений относительного удлинения на удовлетворительном уровне.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 18-38-00709 мол_а.

1. Аккузин С.А., Литовченко И.Ю., Тюменцев А.Н., Чернов В.М. Микроструктура и механические свойства аустенитной стали ЭК-164 после термомеханических обработок // Известия вузов. Физика. 2019. Т. 62. № 4. С. 125–130.

DOI: 10.17223/9785946218412/248

**ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ
НА ОСОБЕННОСТИ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ВЫСОКОАЗОТИСТОЙ
АУСТЕНИТНОЙ СТАЛИ**

¹Салова Ю.С., ^{1,2}Литовченко И.Ю., ^{1,2}Аккузин С.А., ^{1,2}Тюменцев А.Н., ²Наркевич Н.А.

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Высокоазотистые аустенитные стали на хромомарганцевой основе были предложены как альтернатива дорогостоящим хромоникелевым сталям. Эти стали в закаленном состоянии имеют более высокие прочностные свойства по сравнению с традиционными хромоникелевыми аналогами за счет наличия азота в твердом растворе. В условиях холодной пластической деформации, благодаря низкой энергии дефекта упаковки, в них развивается интенсивное механическое двойникование с формированием высокой плотности микродвойников, что обеспечивает высокие прочностные свойства и значительное снижение пластичности. Возможности применения термомеханических обработок для измельчения структуры, повышения прочности с сохранением достаточного запаса пластичности на высокоазотистых аустенитных сталях изучены недостаточно.

В настоящей работе методами просвечивающей электронной микроскопии исследованы особенности структурно-фазовых состояний высокоазотистой аустенитной стали X17AG18Ф2 (Fe – 18,25 Cr – 17,5 Mn – 0,17 Ni – 1,4 V – 0,6 N – 0,1 C, вес %) после высокотемпературной термомеханической обработки. Изучены механические свойства в процессе испытаний на растяжение при комнатной температуре.

Высокотемпературная термомеханическая обработка (ВТМО) стали состояла из горячей пластической деформации при 1100 °С ($\epsilon \approx 35\%$) и последующей теплой деформации при 600 °С ($\epsilon \approx 25\%$). Пластическую деформацию осуществляли прокаткой с предварительным нагревом и выдержкой в печи при указанных температурах ≈ 10 минут.

В исходном (закаленном) состоянии сталь имеет достаточно высокие значения предела текучести ≈ 500 МПа при относительном удлинении $\approx 30\%$. В исходной структуре наблюдается некоторая доля δ -феррита (5 - 20%) и относительно крупные (до нескольких мкм) частицы VN.

Электронно-микроскопические исследования показали, что после горячей деформации с нагревом до 1100 °С пластическая деформация развивается неоднородно в локализованных участках и формируется фрагментированная структура с мало- и высокоугловыми границами разориентации. Крупные частицы VN являются концентраторами напряжений, способствуя локализации деформации. В зернах δ -феррита фрагментация развивается интенсивнее, чем в зернах аустенита. Помимо фрагментированной структуры, в аустените наблюдаются отдельные области, содержащие деформационные микродвойники. Предполагается, что микродвойники могли образоваться при комнатной температуре в процессе релаксации локальных внутренних напряжений, сформированных в результате ВТМО. Последующая теплая деформация при 600 °С способствует дополнительной фрагментации микроструктуры стали.

В процессе испытаний на растяжение показано, что полученные в результате ВТМО структурные состояния обеспечивают повышение прочностных свойств стали. При этом значение предела текучести возрастает на ≈ 300 МПа по сравнению с исходным и сохраняется хорошее значение относительного удлинения – 9,7 %. В условиях рассмотренных ВТМО не формируется высокая плотность микродвойников деформации и не обнаруживаются нитридные частицы Cr₂N, охрупчивающие материал. Это позволило повысить прочность высокоазотистой аустенитной стали X17AG18Ф2, при сохранении достаточного запаса пластичности.

DOI: 10.17223/9785946218412/249

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ РИФЛЕНИИ ПРЕССОВАНИЕМ

^{1,2}Ахметшин Л.Р., ^{1,2}Москвичев Е.Н.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

В работе с использованием методов численного моделирования была решена проблема определения напряженно-деформированного состояния образцов из легких конструкционных сплавов на основе алюминиевого листового металла при обработке интенсивной пластической деформации. Для реализации интенсивной пластической деформации плоских образцов предлагается использовать метод рифления прессованием с высокой скоростью деформации. В статье рассматривается форма с трапециевидными зубцами.

Получение объемных наноструктурных и ультрамелкозернистых материалов является одним из активно развиваемых направлений в современном материаловедении. Объемные ультрамелкозернистые (УМЗ) металлы и сплавы, полученные с помощью методов интенсивной пластической деформации (ИПД), обладают улучшенными, по сравнению с крупнозернистыми аналогами, свойствами – повышенной прочностью, высокой усталостной прочностью, ударной вязкостью, коррозионной и радиационной стойкостью и др. Исследования свойств таких материалов имеют важное как фундаментальное, так и практическое значение [1].

Целью данной работы изучение локализации пластических деформаций и поврежденности в материале. Численное моделирование процесса проводится в двумерной постановке. Процесс интенсивного пластического деформирования алюминиевых образцов при динамическом рифлении прессованием (ДРП) исследован для динамической схемы нагружения.

В работе определены механизмы деформирования образцов листового проката из исследуемого сплава проводили методами численного моделирования. Математическая модель была получена в [2], где модель апробировалась на задаче высокоскоростного пробития пластины.

В качестве исследуемого материала был выбран алюминиевый сплав 1560. Сплав 1560 относится к легким конструкционным сплавам и играет ключевую роль в современной технике, поскольку является практически наиболее часто используемым цветным металлом.

В результате численного моделирования листового проката были получены результаты по распределению эффективных пластических деформаций в образце сплава 1560. За этап рифления в образце пластические деформации локальны и неравномерны; накопление эффективной пластической деформации происходит в области сдвига. Максимальная величина кумулятивной пластической деформации эквивалентна 0,67. При выпрямлении образцов деформация суммируется в области сдвига, то есть за полуцикл ее величина в локальных зонах увеличивается до ~1,22.

Исследования показали, что наибольшие значения параметра поврежденности локализуются на внешней поверхности образца при взаимодействии зубьев пресс-формы с образцом, со значением критерия поврежденности равным 0,33 на первом этапе рифления прессованием, конфигурация которых качественно близка к экспериментальным данным. Также имеют место деформации в промежуточной области, то есть в месте сдвиговых деформаций. С ростом времени в образце, развивается необратимая, неупругая деформация. Развитие неупругой деформации может привести к образованию крупных трещин, как правило, предшествует рассеянное накопление микротрещин. На следующих стадиях деформация концентрируется в полосы локализации, а также возможно образование магистральных трещин, которые пересекают весь образец.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Бодров А. С., Олимпиева Н. В., Зелепугин А. С., Зелепугин С. А. Численное моделирование процессов динамического канально-углового прессования титановых образцов // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2015. № 5(37). С.56–63.
2. L. R. Akhmetshin et al 2019 IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 511 012013.

DOI: 10.17223/9785946218412/250

МОРФОЛОГИЯ УЛЬТРАВЛОКНИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-(3-ГИДРОКСИБУТИРАТА) МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

^{1,2,3}Ольхов А.А., ^{1,3}Тюбаева П.М., ¹Филатова А.Г., ¹Зернова Ю.Н.,

¹Жулькина А.Л., ¹Кучеренко Е.Л., ¹Иорданский А.Л.

¹*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва,*

²*Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва*

³*ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва,*

Одним из экономически целесообразных и технологичных методов формирования наноразмерных и ультратонких полимерных волокон является метод электроформования (ЭФ). Формование полимерных нановолокон в условиях электродинамических взаимодействий и вязкоэластичных деформаций позволяет варьировать их разнообразные структурно-морфологические характеристики, создавать высокую удельную поверхность, регулировать механические свойства и пористость, а также использовать широкий диапазон диффузионных параметров.

В работе использовали поли-(3-гидроксибутират) (ПГБ) с молекулярной массой 460 кДа фирмы BIOMER (Германия), тетрабутиламмоний йодид $\{[\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{N}]\}$ (ТБАИ), муравьиная кислота (МК) (для регулирования вязкости и электропроводности). ЭФ нетканых волокнистых материалов на основе ПГБ осуществляли на лабораторной установке ЭФВ-1 (Россия) при динамической вязкости раствора 0,9 Па*с, удельной объемной электропроводности $\sim 10^{-3}$ (Ом*м)⁻¹, объемном расходе формовочного раствора 10-12·10⁻⁵ г/сек, напряжении электрического поля 15 кВ, расстоянии между электродами 18 см, диаметре капилляра 0,1 мм. Морфологию изучали методами оптической и электронной микроскопии (оптический микроскоп МБИ-6 и Hitachi TM-3000). Теплофизические характеристики получены с помощью дифференциально сканирующего калориметра Perkin Elmer Pyris 6 DSC.

Одними из ключевых характеристик процесса являются электропроводность и вязкость формовочного раствора. Установлено, что низкая электропроводность раствора ПГБ препятствует образованию однородных по толщине волокон. При низких значениях вязкости, в области концентраций ниже 4 мас. %, в процессе ЭФ образовывалась смесь волокон и сферических частиц, тогда как повышение вязкости, соответствующей концентрации 10 мас. % приводило к прекращению процесса ЭФ. Линейный характер обратной величины зависимости вязкости от времени показывает, что кинетика гидролитической деструкции ПГБ в присутствии МК подчиняется уравнению 1-го порядка, что достаточно часто наблюдается при кислотном катализе расщепления сложноэфирных связей, принадлежащих природным и синтетическим полиэфирам в квазигомогенной среде. Характеристики полимерного раствора в значительной степени определяют геометрию и морфологию ультратонких волокон ПГБ, полученных методом ЭФ.

Нами было проведено исследование кинетики роста мезенхимальных стволовых клеток (клетки МСК) в зависимости от плотности упаковки нетканого материала (рис. 1). Открепление клеток от исследуемых имплантатов и их подсчет с помощью камеры Горяева позволяет говорить о значительном увеличении регенерационного потенциала модельного имплантата, модифицированного слоем ультратонких волокон ПГБ.

В работе мы разработали конструкцию искусственного биорезорбируемого имплантата для восстановительной хирургии соединительной ткани на основе нетканого волокнистого материала. Имплантат представляет собой каркас из нескольких несущих моноволокон с покрытием биорезорбируемым волокнистым материалом на основе ПГБ.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

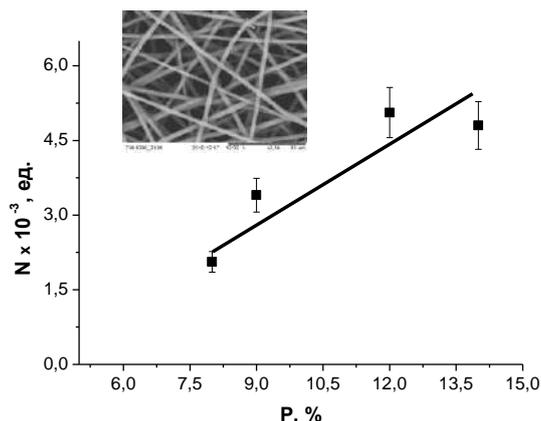


Рис. 1. Зависимость усредненного за 8 суток количества клеток (N) от плотности упаковки волокон (P) в полученных матриксах. На вставке изображение нетканого материала, полученное СЭМ.

Конструкция искусственного имплантата позволяет многократно увеличить удельную поверхность, что приводит к существенному повышению сорбции сигнальных молекул регенерации, усилению миграции клеток по всему объему имплантата и обеспечивает значительное повышение регенерации соединительной ткани. Изучаемые волокнистые материалы ПГБ могут содержать лекарственные вещества. Кинетику высвобождения дипиридамола (ДПД) из волокон ПГБ определяли по методике [1]. Структурно-кристаллические характеристики волокнистых материалов и кинетические профили высвобождения ДПД (рис. 2) позволяют считать, что лимитирующей стадией общего процесса высвобождения является первая стадия – диффузия в волокне.

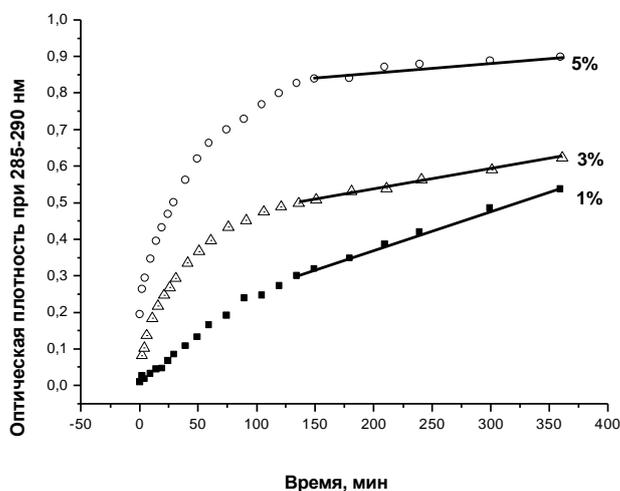


Рис. 2. Кинетические профили контролируемого высвобождения ДПД из ультратонких волокон ПГБ в зависимости от концентрации ДПД.

Работа выполнена при финансовой поддержке РЭУ им. Г.В. Плеханова. Диффузионные эксперименты проведены ФИЦ ХФ РАН в рамках темы АААА-А17-117040610309-0.

1. Иорданский А.Л., Ольхов А.А., Карпова С. Г., Кучеренко Е.Л., Косенко Р.Ю., Роговина С.З., Чалых А.Е., Берлин А.А. Влияние структуры и морфологии ультратонких волокон поли-3-гидроксibuтирата на диффузионную кинетику и транспорт лекарственных веществ // Высокомолекулярные соединения. Серия А. 2017. Том 59. № 3. С. 273–284.

DOI: 10.17223/9785946218412/251

THE GRAIN STRUCTURE IN THE LAYER OF ZR-Y-O IN COATING ON THE BASIS OF Zr-Y-O / Si- Al-N DEPEND ON ANNEALING TIME AT 900°C IN THE «IN-SITU» MODE

^{1,2}Fedorischeva M.V, ^{1,2}Kalashnikov M.P, ^{1,2}Bozhko I. A. and ^{1,2}Sergeev V. P.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science, SB RAS, Tomsk*

²*National Research Tomsk Polytechnic University, Toms,*

Zirconium-based ceramics holds the leading place among the fire-resistant constructional materials as it retains the high mechanical properties up to 0.8–0.9 of the melting temperature of 3173 K. That is why ZrO₂ coatings are mainly used as the thermal barrier coatings in hot turbine sections and other engine units.

A special attention is paid to the reversible martensitic transformations in metal alloys (the so-called transformational conversion due to the practical use potential in many fields of science, technology, medicine and industry. These alloys belong to the group of the so-called “smart” functional materials, as they allow controlling their behavior [1]. These are transformation-hardening materials that are widely used in engineering practice as structural materials. The majority of such ceramic materials are developed based on zirconium dioxide that is partially stabilized in the tetragonal phase.

The purpose of this paper is to study the structural-phase state and the evolution of the grain structure of the multilayer coating based on Zr-Y-O/ Si-Al-N using high-temperature TEM at 900°C at different annealing times.

The coatings deposition was carried out using KVANT-03MI unit equipped with a mosaic zirconium-yttrium target magnetron. The magnetron was powered from a pulse source at a frequency of 50 kHz. The samples were placed in the chamber on the rotating table. The sample temperature during the deposition was 573K. A study of the structural features of the coating was carried out on a DRON-7 instrument. The fine structure of the nanostructured coatings was studied by TEM using the JEM-2100 microscope.

It was shown by X-ray that annealing at a temperature of 900°C leads to an insignificant decrease in the monoclinic phase, a change in the predominant direction. The degree of tetragonality of the crystal lattice does not change, the size of the coherent scattering blocks decreases.

It has been established by TEM that the coatings on the basis of Zr-Y-O produced by the magnetron sputtering methods have a nanograin column structure where the columns are spread through the entire coating thickness.

At heating the layer in the TEM column in the “in-situ” mode one can observe a) martensitic transition of the tetragonal phase to the monoclinic one in temperature interval of 400-500°C, b) the grain size decreases compared with the initial grain size in the coating, c) the modification of the grain boundaries, i.e. their total length increases, the form of the grains changes, in initial column grains there are cross boundaries, which suggest the fragmentation of grains.

1. A. Petra Langjahr, Rainer Oberacker, and Michael J. Hoffmann Long-Term Behavior and Application Limits of Plasma-Sprayed Zirconia Thermal Barrier Coatings, *J. Am. Ceram. Soc.*, 84 (2001) 1301–308.
2. Y. Tamarin, *Protective Coatings for Turbine Blades USA* (ASM International, 2002). pp. 3-300.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/252

СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ МЕДНОЙ ПОДЛОЖКИ ПРИ ОБРАБОТКЕ ИОННЫМ ПУЧКОМ ЦИРКОНИЯ

^{1,2}Федорищева М.В., ^{1,2}Калашников М.П., ^{1,2}Божко И.А., ^{1,2}Сергеев В.П.

¹*Институт физики прочности и материаловедения, Томск*

²*Томский политехнический университет, Томск*

Ионно-плазменные методы нанесения многослойных нанокompозитных покрытий и высокоэнергетические обработки поверхностных слоев позволяют достичь глубокого модифицирования их структурно-фазового состояния. Среди методов перспективным направлением повышения эксплуатационных свойств конструкционных материалов является ионно-пучковая модификация. С помощью обработки сильноточными потоками тяжелых ионов низкой энергии можно эффективно модифицировать структурно-фазовое состояние поверхностного слоя. При этом могут улучшаться триботехнические, механические свойства, в том числе, усталостные характеристики конструкционных материалов [1].

Элементные пары «ионный пучок- обрабатываемый металл» подбираются из тех систем, в которых возможно образование интерметаллидов. В системе Cu-Zr также возможно образование целого ряда интерметаллидных фаз, приводящих к изменению физико-механических характеристик медной подложки. Однако эта проблема в данной системе мало изучена. Цель работы состоит в исследовании влияния обработки ионными пучками циркония на морфологию поверхности, фазовый состав и микроструктуру поверхностных слоев образцов меди.

Морфологию поверхности и микроструктуру облученных образцов исследовали с помощью растрового электронного микроскопа LEO EVO 50 и просвечивающего электронного микроскопа JEM-2100. Элементный состав модифицированных поверхностных слоев определяли методом рентгеновского микроанализа с помощью детектора INCA X-act. Рентгенографические исследования образцов выполняли на дифрактометре ДРОН-7.

Известно, что облучение медной подложки тяжелыми ионами может вызывать изменения рельефа поверхности. Они происходят вследствие явлений, инициированных в приповерхностных слоях ионным или плазменным воздействием. К таким явлениям относятся возникновение ионно-индуцированных напряжений, зарождение и движение дислокаций, рекристаллизация, изменение состава приповерхностного слоя.

В результате проведенных исследований установлено, что бомбардировка ионами Zr⁺ приводит к существенному изменению морфологии поверхности подложки Си. Механически полированная поверхность медной подложки в результате обработки (травления) сильноточным потоком ионов циркония приобретает ячеистую структуру. Средний размер ячеек варьируется в пределах от 100 до 300 нм.

Согласно данным рентгеновского энергодисперсионного микроанализа, в результате бомбардировки ионами циркония поверхностный слой медной подложки характеризуется следующим составом: Си - 80 ат.%, Zr - 20 ат.%. Необходимо также отметить наличие в модифицированном поверхностном слое некоторого количества атомов кислорода и углерода.

Методом рентгеновской дифракции установлено, что в поверхностном слое образцов меди, подвергнутых обработке ионным пучком циркония присутствуют фазы равновесной диаграммы состояния, такие как CuZr₂, Cu₅₁Zr₁₄ а также различные интерметаллидные фазы системы Cu-Zr (рис. 1). Обнаруженные интерметаллидные фазы системы Cu-Zr являются диаграммными.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

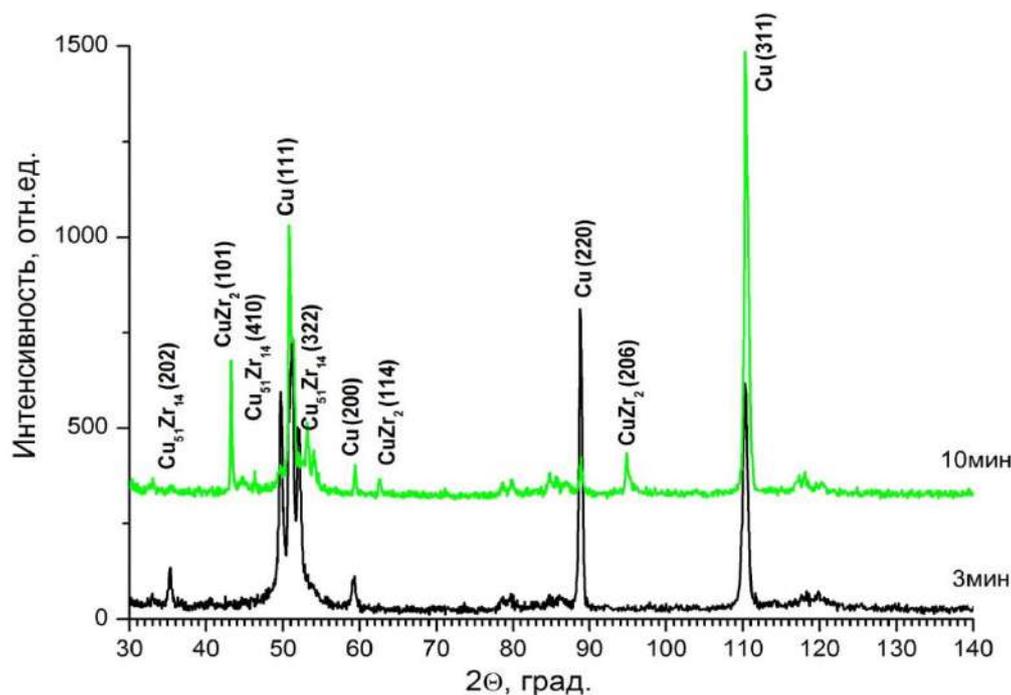


Рис.1. Дифракционная картина медного сплава, обработанного ионами циркония при разной продолжительности обработки.

Микроструктурные исследования, проведенные методом просвечивающей электронной микроскопии, выявили в модифицированном поверхностном слое наличие интерметаллидных фаз со средним размером 10-20 нм. Нанокристаллическая структура модифицированного поверхностного слоя образована медью, подтверждается кольцевым строением микроэлектронограмм. Обнаружено присутствие различных интерметаллидных фаз системы Cu-Zr и оксида циркония ZrO₂, что хорошо согласуется с данными рентгеноструктурного анализа.

Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что при обработке образцов меди пучком ионов циркония имеет место как формирование интерметаллидного поверхностного слоя, имеющего нанокристаллическую структуру, так и рекристаллизация приповерхностного слоя медной подложки. Методами просвечивающей электронной микроскопии и рентгеноструктурного показано, что модифицированный поверхностный слой состоит из большого количества интерметаллидных фаз системы Cu-Zr и оксида циркония ZrO₂.

1. Панин В.Е., Сергеев В.П., Панин А.В. Наноструктурирование поверхностных слоев конструкционных материалов и нанесение наноструктурных покрытий. Томск, изд-во ТПУ, 2008, 276 с.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/253

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОГО И ФАЗОВОГО СОСТАВА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ТЕРМИЧЕСКУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫХ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ

^{1,2}Найденкин Е.В., ¹Раточка И.В., ¹Мишин И.П., ¹Лыкова О.Н.

¹ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

В настоящее время титановые сплавы благодаря уникальному комплексу физико-механических свойств широко используются во многих областях авиа- и машиностроения. Формирование ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры ($d < 1$ мкм) с использованием методов интенсивной пластической деформации (ИПД) приводит к повышению их прочностных свойств, а также реализации, при определенных условиях, низкотемпературной и/или высокоскоростной сверхпластичности. При этом, механическое поведение таких материалов в широком интервале температур деформации определяется не только размером зерен, но и структурно-фазовым состоянием, а также высокой степенью неравновесности и, как следствие, увеличенной диффузионной проницаемостью границ зерен. Несмотря на большое число работ в этой области до настоящего времени остаются мало изученными особенности измельчения методами ИПД зеренной структуры в высоколегированных титановых сплавах переходного класса, обеспечивая повышение их механических характеристик. В связи с этим, в настоящей работе проведен сравнительный анализ механических характеристик и термической стабильности ультрамелкозернистых титановых сплавов, полученных ИПД методом всестороннего прессования, и относящихся к различным классам, в зависимости от содержания в них легирующих элементов.

В работе проведены исследования структуры и фазового состава титановых сплавов в ультрамелкозернистом состоянии, полученном с использованием метода всестороннего (*abc*) прессования, их механические свойства в условиях растяжения при комнатной температуре и термическая стабильность структуры в интервале температур отжига 673-1173К. На примере титановых сплавов псевдо α (Ti-4Al-2V), $\alpha+\beta$ (Ti-6Al-4V) и переходного класса (Ti-5Al-5Mo-5V-1Cr-1Fe) показано, что обработка методом *abc* прессования приводит к формированию однородной ультрамелкозернистой структуры со средним размером элементов зеренно-субзеренной структуры около 0,2 мкм. В результате этого наблюдается существенное повышение прочностных свойств указанных УМЗ сплавов по сравнению с их крупнозернистыми аналогами при сохранении удовлетворительной пластичности. При этом, следует отметить, что увеличение содержания легирующих элементов приводит к снижению вклада в прочностные характеристики УМЗ титановых сплавов от зернограничного упрочнения (измельчения структуры), что связано с соответствующим ростом вклада от твердорастворного упрочнения. Изучение термической стабильности сформированной методом *abc* прессования ультрамелкозернистой структуры показало, что в псевдо α и в $\alpha+\beta$ титановых сплавах она сохраняется при отжигах до температуры 773К (0,4 $T_{пл}$). В тоже время в титановом сплаве переходного класса ультрамелкозернистая структура сохраняется после часового отжига при значительно более высокой температуре 1073К (0,55 $T_{пл}$). Установлено, что причинами более высокой стабильности УМЗ структуры в титановом сплаве переходного класса является двухфазная микродуплексная структура с высокой объемной долей β -фазы (~35%), сформированная в результате воздействия интенсивной пластической деформацией.

Работа выполнена в рамках ПФНИ ГАН на 2013-2020 годы, направление Ш.23, исследования на сплаве переходного класса выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №19-19-00033).

DOI: 10.17223/9785946218412/254

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОПЕРЕЧНО-ВИНТОВОЙ ПРОКАТКИ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТРУБНОЙ СТАЛИ 09Г2С

¹Власов И.В., ²Сурикова Н.С., ²Мишин И.П.,

^{1,2}Панин С.В., ¹Смирнова А.С., ²Яковлев А.В., ²Станкевич Р.В.

¹Томский политехнический университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Высокие прочностные характеристики конструкционных сталей традиционно достигаются путём введения различных легирующих элементов, проведения сложных многоступенчатых термомеханических обработок и т. д. С другой стороны, малоуглеродистые низколегированные стали характеризуются невысокими прочностными свойствами, сочетающими высокую пластичность/вязкость и хорошую свариваемость. Однако, применение к ним обработок, совмещающих достижение высоких степеней деформации и контролируемого термического воздействия с последующим охлаждением, могут приводить к существенному повышению, как предела текучести, так и предела прочности [1, 2]. Таким образом, возможно изготовление высокопрочных и ответственных деталей без использования дорогостоящего легирования. Недостатком таких обработок является создания сильно деформированного состояния, зачастую сопровождающегося охрупчиванием материала.

Для решения проблемы повышения прочности и снижения хрупкости низколегированных сталей используют, в том числе, контролируемую прокатку, обеспечивающую градиентную модификацию структуры в объеме материала [3]. Тем самым достигается формирование материала с повышенной прочностью в поверхностном слое и сохранением вязкости/пластичности в сердцевине. Одним из таких методов, активно разрабатываемых в ИФПМ СО РАН для трубных сталей, является «теплая» поперечно-винтовая прокатка. Предварительно подобранные температурно-деформационные режимы прокатки [4], включая количество проходов, позволяют формировать в объёме материала многоуровневую структуру с высокими диссипативными свойствами, эффективно подавляющую локализацию пластического течения и значительно сдерживающую зарождение и распространение трещин.

В качестве объекта исследования была выбрана конструкционная низколегированная сталь 09Г2С, широко применяемая как в строительстве трубопроводных систем, так и для элементов несущих конструкций различного назначения. Прокатку прутков проводили на трёхвалковом стане. Было выполнено 5 проходов от температуры 850 С с закалкой в воду после каждого прохода ($E_{\text{сумм}}=73,77\%$). Целью данного исследования является изучение влияния поперечно-винтовой (ПВ) прокатки на структуру и механические свойства данной стали.

В состоянии поставки сталь 09Г2С имеет феррито-перлитную структуру с характерным размером зерна 21 ± 2 мкм. После ПВ-прокатки в продольном и поперечном направлении в поверхностном слое глубиной 1 мм формируется мелкодисперсная структура, состоящая из феррита и разрушенных пластин перлитной фазы. Проведены исследования структуры стали в состоянии поставки и после прокатки с помощью просвечивающего электронного микроскопа (рис. 1,а,б). В перлитном зерне материала без прокатки видны характерные пластины цементита толщиной 100-150 нм (рис. 1,а). В ферритной фазе встречаются карбидные включения размером 250-400 нм. После прокатки происходит измельчение ферритного зерна и разрушение цементитных пластин (рис. 1,б). Средний размер субзерна после прокатки составляет порядка 300 нм, а в поверхностном слое может достигать 100 нм.

Проведено измерение микротвёрдости в поперечном сечении прутка после ПВ-прокатки от поверхности к центру (рисунок 1,в). Наибольшее увеличение микротвёрдости наблюдается в поверхностном слое глубиной до 3 мм, а упрочнение происходит по всему объёму прутка. Образцы для испытаний на статическое растяжение вырезали из прутка после ПВ-прокатки на глубине от 3 мм, где перепад значений микротвёрдости был не таким большим, как в

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

поверхностном слое. Это приводило к умеренному разбросу характеристик прочности при растяжении (таблица 1). По результатам испытаний на статическое растяжение видно, что после ПВ-прокатки сохраняется как зуб, так и площадка текучести (рисунок 1,г). Напряжение на площадке текучести и предел пропорциональности повышаются на 26%, а зуб текучести по уровню напряжений сопоставим с пределом прочности. Протяженность площадки текучести увеличивается в 3 раза.

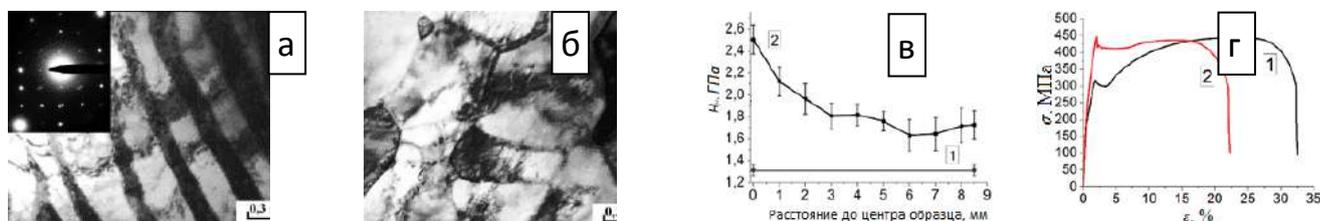


Рис. 1 – а) структура стали 09Г2С в исходном состоянии, б) после ПВ-прокатки; в) график микротвёрдости прутка после проката от края к центру; г) диаграмма растяжения; 1-в состоянии поставки; 2 - после проката

Таблица 1 – Результаты механических испытаний на статическое растяжение

Состояние	$\sigma_{ц}$	$\sigma_{пл.текучести}$	$\epsilon_{пл.текучести}, \%$	$\sigma_{зуб текучести}$	$\sigma, \text{МПа}$	$\epsilon, \%$
Исходное	163±10	297±10	1,9±0,1	307±20	443±20	32±3
Прокат	219±10	403±20	6±0,5	431±20	438±20	21±3 (↓34%)

Таким образом, в результате ПВ-прокатки стали 09Г2С происходит градиентное измельчение структуры, от мелкодисперстного состояния в поверхностном слое до формирования текстуры и измельчения зёрен в сердцевине. Подобные изменения приводят к повышению микротвёрдости с аналогичным градиентным распределением. На диаграмме нагружения образца после ПВ-прокатки сохраняется стадия «параболического упрочнения», значение предела прочности не изменилось, а снижение величины прикладываемой нагрузки при статическом растяжении происходит плавно, аналогично необработанному материалу.

Благодарности: Работа выполнена в рамках плана фундаментальных научных исследований государственных академий наук 2013-2020 гг. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 18-38-00679 и 18-08-00516, а также грантов президента НШ-5875.2018.8 и СП-2456.2019.1.

1. Cao. R., Ding. Y., Zhao X., et. al. Effect of rolling reductions on microstructure and properties of 2Cr13/316L multi-layered steel composite plate by accumulative roll-bonding // Journal of Materials Research. 2018. Vol. 33. Issue. 24. P. 4317-4328.
2. Samant S.S., Singh I.V., Singh R.N. Influence of intermediate rolling on mechanical behavior of modified 9Cr-1Mo steel // Materials Science and Engineering a Structural Materials Properties Microstructure and Processing. 2018. Vol. 738. P. 135-152.
3. Деревягина Л.С., Гордиенко А.И. Улучшение механических свойств и характеристик низкотемпературного разрушения трубной стали // Сборник трудов конференции Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций. 2018. С. 340-34.
4. Пишулова А.А., Гордиенко А.И., Деревягина Л.С. Влияние температурных режимов поперечно-винтовой прокатки на особенности формирования структуры и механические свойства низкоуглеродистой трубной стали // Сборник трудов конференции Перспективные материалы конструкционного и медицинского назначения. 2018. С. 76-77.

DOI: 10.17223/9785946218412/255

ИЗМЕНЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ СПЛАВА TiNi В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЧИСЛА ИМПУЛЬСОВ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

¹Дьяченко Ф.А., ²Яковлев Е.В., ^{1,3}Мейснер Л.Л., ¹Шулепов И.А., ³Атовуллаева А.А.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

³Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

Эффективным способом модификации механических и физико-химических свойств поверхностных слоёв металлических материалов является обработка их поверхности импульсным низкоэнергетическим (10–30 кэВ) сильноточным (10–25 кА) электронным пучком (НСЭП). Большой интерес представляют исследования влияния НСЭП-обработок на изменения поверхностных свойств сплава на основе никелида титана (TiNi сплав), обладающего функциональными свойствами на основе эффектов памяти формы и сверхэластичности (ЭПФ-СЭ). Однако НСЭП-обработка не всегда положительно влияет на интегральные механические и функциональные свойства TiNi сплава. В частности, это связано с тем, что в модифицированных микронных поверхностных слоях возникает столбчатая структура, ориентированная перпендикулярно поверхности обработки. В исследованиях физико-химических свойств поверхностных слоёв TiNi сплава было обнаружено, что в результате НСЭП-обработок происходит селективное испарение никеля с поверхности. Этот факт необходимо учитывать на основании того, что изменение химического состава в никелиде титана может приводить к смещению температурных интервалов мартенситных превращений, обуславливающих наличие неупругих эффектов (ЭПФ-СЭ). Для контроля химического состава, в данном исследовании проводится модернизация способа анализа физико-химических свойств методом электронной Оже-спектроскопии (ЭОС).

На основании вышесказанного целью данной работы являлось – исследование изменения механических и физико-химических свойств поверхностных слоёв сплава TiNi в зависимости от числа импульсов воздействия электронным пучком.

Для исследований использовали образцы размерами 10×10×1 мм, которые были вырезаны методом лазерной резки из горячекатаного листового проката, изготовленного из промышленного сплава на основе TiNi марки ТН1 (ООО «Промышленный центр МАТЕК-СПФ», Россия). Химический состав сплава: Ti–55.08 Ni–0.051 С–0.03 О–0.002 N (вес. %). Исходные поверхности всех образцов перед облучением подготовлены следующим образом: 1) пошаговая механическая шлифовка/полировка до «зеркального блеска» на шлифовально-полировальном станке *Saphir 550* (АТМ GMBH, Германия) с постепенным уменьшением зернистости абразива (Р120, Р320, Р600, Р1200); 2) электролитическая полировка в растворе кислот (3 ч. CH₃COOH + 1 ч. HClO₄); 3) промывка в ультразвуковой ванне с дистиллированной водой ($t = 15$ мин). Модификацию поверхности образцов TiNi сплава проводили на автоматизированной электронно-пучковой установке «РИТМ-СП» (ООО «Микросплав, Россия) в режиме поверхностного плавления. Плотность энергии электронного пучка $E_s = 1,7$ Дж/см²; длительность импульса $\tau = 2–2,5$ мкс; число импульсов воздействия $n = 5$ и $n = 15$.

Исследование механических свойств поверхностных слоёв образцов TiNi сплава после НСЭП-обработок проводили методом инструментального наноиндентирования на установке *Nano Hardness Tester* (CSM, Швейцария) ЦКП НИИ ЯФ ТПУ (Россия, Томск). По полученным *P-h* диаграммам с использованием методики Оливера-Фарра были определены значения динамической («невосстановленной») твёрдости H_{IT} и модуля Юнга E_{IT} . Склонность материала необратимо деформироваться под действием нагрузки оценивали, используя параметр пластичности δ_n . Функциональные свойства на эффект сверхэластичности, оценивали, используя параметр η , характеризующий степень неупругого восстановления отпечатка индентора.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Анализ физико-химических свойств поверхностных слоёв образцов TiNi сплава после НСЭП-обработок проводили с помощью модернизированного Оже-электронного спектрометра «09ИОС-10-005» (ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ СО РАН, Россия Томск), позволяющего сразу получать Оже-спектры в виде интегральных зависимостей числа регистрируемых электронов N от их энергии E . Спектрометр обеспечивал регистрацию Оже-электронов с разрешением по энергии $\Delta E = 0,75\%$. Величина предельного остаточного давления $P \approx 1,33 \cdot 10^{-7}$ Па. Энергия первичного электронного пучка составляла 3 кэВ, диаметр пучка - ~ 10 мкм. В ходе регистрации Оже-электронов получали зависимости дифференциального вида $dN(E)/dE$. В результате аналитического восстановления из спектров $dN(E)/dE$ получали интегральные зависимости $N(E)$ -1. Независимо от этого, регистрировали Оже-спектры – $N(E)$ -2.

Исследования механических свойств методом инструментального наноиндентирования показали, что модификация поверхности приводит к изменению механических свойств по глубине от поверхности облучения. Установлено, что после НСЭП-обработки с числом импульсов воздействия $n = 5$ в поверхностном слое толщиной до ~ 500 нм произошло изменение свойств: $E_{IT} \approx 60$ ГПа, $H_{IT} \approx 5,5$ ГПа, $\delta_H \approx 40\%$ (относительно параметров образца TiNi до НСЭП-обработок $E_{IT} = 60$ ГПа, $H_{IT} = 4$ ГПа, $\delta_H \approx 48\%$). При $n = 15$ изменение свойств достигают глубины до ~ 1000 нм, где значение параметров, описывающих механические свойства, изменяются следующим образом: E_{IT} от ~ 100 до ~ 55 ГПа, H_{IT} от $\sim 5,2$ до $\sim 2,5$ ГПа, $\delta_H \approx 65\%$. В обоих случаях НСЭП-обработок степень неупругого восстановления формы отпечатка в поверхностном слое на глубине более ~ 1000 нм понизилась не более чем на $\sim 10\%$.

Установлено, что в результате аналитического восстановления спектров $dN(E)/dE$ к интегральному виду $N(E)$ -1 происходит искажение получаемого результата. Так, сравнение интегральных зависимостей, полученных экспериментально $N(E)$ -2 и в ходе аналитического восстановления $dN(E)/dE \rightarrow N(E)$ -1, показало несоответствие формы основных спектральных линий. Более того, Оже-линии слабой интенсивности, которые отчётливо наблюдаются на зависимостях $dN(E)/dE$, полностью исчезают на аналитически восстановленных спектрах $N(E)$ -1.

Сравнение экспериментально полученных Оже-спектров $N(E)$ -2 с дифференциальными показало, что на спектрах $N(E)$ -2 величина Оже-линий по интенсивности и их форма с некоторой долей ошибки совпадают с поведением Оже-линий в дифференциальном виде $dN(E)/dE$. Однако, на экспериментально полученных Оже-спектрах $N(E)$ -2, наблюдается совокупность беспорядочно распределённых пиков (шум), физическую природу которых планируется установить и устранить в запланированных исследованиях.

Результаты, обсуждаемые в данной работе, показали, что возможно экспериментальное получение интегральных зависимостей Оже-спектров $N(E)$ -2.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект РНФ №18-19-00198 от 26.04.2018).

DOI: 10.17223/9785946218412/256

ВЛИЯНИЕ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ ПОРОШКА $Al_2O_3-ZrO_2-Y_2O_3$ И СВОЙСТВА СПЕЧЁННОЙ КЕРАМИКИ

¹Севостьянова И.Н., ¹Саблина Т.Ю., ¹Молчунова Л.М.,

¹Рыжова Л.Н. ^{1,2}Буякова С.П., ^{1,2}Кульков С.Н.

¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

²*Россия, Томский государственный университет, Томск*

Нанокристаллические порошки $Al_2O_3-ZrO_2-Y_2O_3$, полученные методом плазмохимического синтеза, имеют сложное морфологическое строение, что сдерживает их широкое практическое использование. Одним из путей повышения технологических свойств таких порошков является низкоэнергетическая механическая обработка.

Целью данной работы является исследование влияния времени низкоэнергетической механической обработки в шаровой мельнице на свойства порошков $Al_2O_3-ZrO_2-Y_2O_3$ - морфологию, насыпную плотность, площадь удельной поверхности и на физико-механические свойства спеченной керамики.

Исследовали ультрадисперсный нанокристаллический керамический порошок состава $Al_2O_3-20\text{вес.}\%(ZrO_2+3\text{мол.}\%Y_2O_3)$, полученный разложением водных растворов солей металлов в плазме высокочастотного разряда. Механическую обработку (МО) порошка проводили в шаровой мельнице в течение от 1 - 100 часов. Спекание спрессованных при давлении 100 и 200 МПа образцов проводили в воздушной печи при температуре 1600°C, с выдержкой 1 час и 10 часов.

Показано, что после 10 часов механической обработки происходит разрушение полых сферических частиц и частиц «пенообразной» формы. С увеличением времени механической обработки до 25 часов, помимо разрушения частиц, наблюдаются процессы агломерирования частиц разной формы. С дальнейшим увеличением времени МО до 100 часов происходят процессы закатывания обломков в округлые частицы. С увеличением времени МО повышаются насыпная плотность порошка с 0.1 до 0.8 г/см³ и средний размер агломерированных частиц порошка с 4 до 12 мкм. Площадь удельной поверхности порошков изменяется по кривой с максимумом при 25 часов МО.

Пористость спеченных образцов зависит от времени МО, давления прессования и времени выдержки при спекании. При спекании образцов керамики с выдержкой 1 час пористость уменьшается в зависимости от времени МО от 45 до 10%, при этом увеличение давления прессования образцов до 200 МПа приводит к снижению пористости. При спекании образцов с длительной выдержкой (10 часов), в образцах спрессованных при давлении 100 МПа пористость образцов уменьшается с 18 до 4% в зависимости от времени МО, а в образцах спрессованных при давлении 200 МПа пористость образцов составляет 4% и не зависит от времени МО. Средний размер зерна керамики спеченных с выдержкой в течение 1 часа не зависит от времени МО и составляет 2.1 ± 0.1 мкм, а при спекании 10 часов увеличивается от времени предварительной МО порошка с 2.9 до 3.8 мкм. Предел прочности при изгибе спеченных при малых временах увеличивается до 25 часов МО с 50 до 250 МПа, а при дальнейшем времени механической обработки не изменяется. С увеличением выдержки при спекании до 10 часов, предел прочности при изгибе увеличивается с увеличением времени предварительной механической обработки порошка с 126 до 250 МПа для образцов спрессованных при давлении 100 МПа. В образцах, спрессованных при давлении 200 МПа, продолжительность предварительной механической обработки порошка не влияет на предел прочности при изгибе.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук России на 2013-2020 гг., раздел III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/257

**СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СИЛИКАТНЫХ ПОКРЫТИЙ НА
БИОРЕЗОРБИРУЕМОМ СПЛАВЕ Mg-0.8Ca**

^{1,2} Угодчикова А.В., ¹ Седельникова М.Б., ^{1,2} Шаркеев Ю.П., ¹ Толкачева Т.В.,
¹ Комарова Е.Г., ¹ Толмачев А.И., ³ Шмидт Д.

¹ *Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

² *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*

³ *Innovent Technology Development, Jena, Germany*

Одним из развивающихся направлений медицинского материаловедения является разработка биодеградируемых имплантатов с контролируемой скоростью биорезорбции, не оказывающих негативного воздействия на организм человека и выполняющих свои функции в течение необходимого для восстановления поврежденной кости времени. Использование таких имплантатов исключает необходимость проведения повторных операций. Магниевые сплавы перспективны для использования в качестве биодеградируемых имплантатов, поскольку обладают рядом преимуществ [1]. Плотность и модуль Юнга магния и его сплавов сопоставимы с величинами этих параметров для кортикальной кости. Однако основным фактором, сдерживающим использование магниевых сплавов в качестве биодеградируемых материалов, является их чрезвычайно высокая коррозионная активность в хлоридсодержащих средах, что приводит к преждевременной потере механической прочности имплантата до момента восстановления костной ткани. Одним из путей снижения скорости коррозии магния является формирование на его поверхности защитных покрытий, с одной стороны обладающих антикоррозионными свойствами, и с другой, ускоряющих процессы остеоинтеграции [2].

Среди известных методов формирования покрытий на металлических поверхностях метод микродугового оксидирования (МДО) является наиболее технологичным и востребованным для нанесения биологически активных покрытий. Формирование покрытия происходит в результате протекания высокотемпературных плазмохимических реакций в зоне локальных микроарядов, под воздействием внешнего источника высокого напряжения [3,4].

Известно, что кальцийфосфатные соединения, такие как гидроксиапатит и трикальцийфосфат чаще всего используются в качестве основы для биоактивных покрытий [4]. Однако, также известно, что биокерамика на основе силикатов кальция и магния обладает превосходной способностью стимулировать образование и рост костной ткани [5,6]. Целью представленных исследований было формирование методом МДО силикатных биопокрытий в системе CaO–MgO–SiO₂ на поверхности биорезорбируемого магниевых сплава, исследование влияния электрофизических параметров процесса МДО на физико-химические свойства, морфологию поверхности и структуру покрытий.

В качестве образцов для проведения экспериментов использовали металлические пластинки размером 10×10×1 мм³ из сплава Mg-0,8Ca. В состав электролита для получения покрытий методом МДО входили следующие компоненты: CaSiO₃, Na₂SiO₃, NaOH, NaF. Нанесение покрытий осуществлялось на установке «Micro Arc 3.0 System» в ИФПМ СО РАН. Покрытия наносили в анодном потенциостатическом режиме, при напряжении процесса 350–500 В, длительности процесса 5 мин, длительности импульсов 100 мкс, частоте следования импульсов 50 Гц [4].

Исследование морфологии поверхности и элементного состава покрытий проводили с помощью растрового электронного микроскопа (LEO EVO 50 с приставкой для энергодисперсионного анализа, ЦКП ИФПМ СО РАН «Нанотех», г. Томск). Фазовый состав покрытий определяли методом рентгенофазового анализа с использованием CoK_α-излучения (ДРОН-07, ЦКП ИФПМ СО РАН «Нанотех», г. Томск).

Анализ РЭМ – изображений показал, что покрытия имеют развитую морфологию поверхности. В покрытиях наблюдаются кристаллы (рис. 1 а) удлиненной формы, характерной для волластонита (CaSiO₃). В результате анализа элементного состава покрытий установлено

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

повышенное содержание кремния и кальция в кристаллах. Кроме того, в покрытиях также присутствуют поры размером 1,5–5,0 мкм, равномерно распределенные по всей поверхности. С ростом напряжения процесса до 450–500 В количество кристаллов и пор заметно увеличивается. В изломе покрытия также имеют пористую структуру (рис. 1 б).

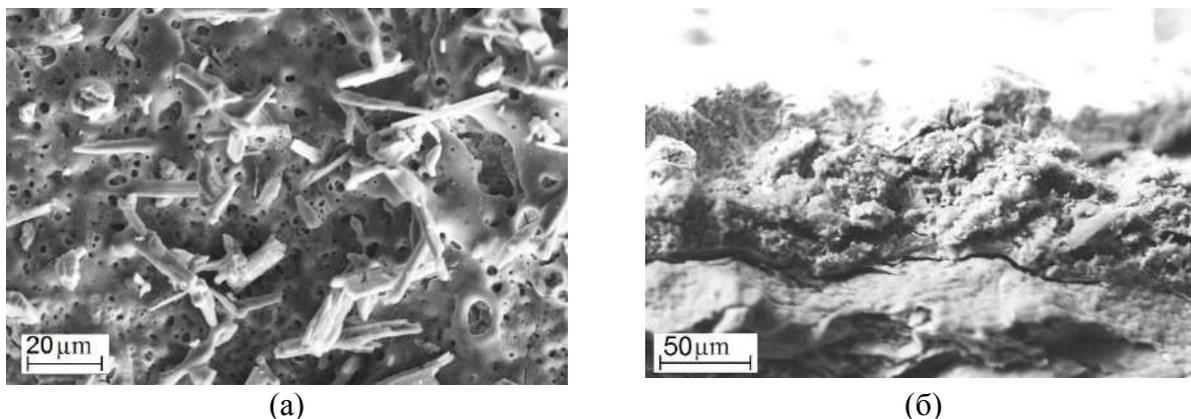


Рис. 1. РЭМ-изображения поверхности (а) и излома (б) силикатного покрытия на сплаве Mg-0,8Ca, нанесенного при напряжении процесса 350 В

Фазовый состав покрытий представлен кристаллическими фазами волластонита и окерманита (CaSiO_3 и $\text{Ca}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$). Было исследовано коррозионное поведение образцов сплава без покрытий и с покрытиями при выдерживании пластинок в растворе 0.9% NaCl, в течение 15 суток. Установлено, что потеря массы образцов сплава без покрытий при растворении в 4 раза превышает потерю массы образцов с покрытиями. Наиболее высокой коррозионной стойкостью характеризуются покрытия, нанесенные при напряжении 400 В.

В результате проведенных исследований на поверхности сплава Mg-0,8Ca методом МДО сформированы пористые силикатные покрытия с кристаллами волластонита. Покрытия имеют развитый рельеф и проявляют защитные антикоррозионные свойства, замедляя скорость биорезорбции магниевого сплава.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований СО РАН, 2013–2020 гг., проект № III.23.2.

1. Tian, P.; Liu, X. Surface modification of biodegradable magnesium and its alloys for biomedical applications. *Regen. Biomater.* 2015, 2, 135–151. <https://doi.org/10.1093/rb/rbu013>
2. M. B. Sedelnikova, E. G. Komarova, Y.P. Sharkeev, T. V. Tolkacheva, V. V. Sheikin and J. Schmidt. Characterization of the Micro-Arc Coatings Contained β -Tricalcium Phosphate Particles on Mg-0.8Ca Alloy, *Metals* 2018, 8(4), 238; doi:10.3390/met8040238
3. А.И. Мамаев, В.А. Мамаева. Сильноточковые процессы в растворах электролитов. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2005, 255 с.
4. М.В. Sedelnikova, E.G. Komarova, Yu.P. Sharkeev, A.V. Ugodchikova, L.S. Mushtovatova, M.R. Karpova, V.V. Sheikin, L.S. Litvinova, I.A. Khlusov, Antibacterial micro-arc coatings on Ti and Ti-40Nb alloy: characterization of the properties and behavior in synthetic biological media // *Surface and Coating Technology*. 2019. – V. 369. – P. 52-68, <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2019.04.021>
5. Dandan Hu, Kai Li, Youtao Xie, Houhua Pan, Jun Zhao, Liping Huang, Xuebin Zheng, Different response of osteoblastic cells to Mg^{2+} , Zn^{2+} and Sr^{2+} doped calcium silicate coatings *J Mater Sci: Mater Med* (2016) 27:56.
6. M.A. Sainz, P. Pena, S. Serena, A. Caballero // Influence of design on bioactivity of novel CaSiO_3 – $\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2$ bioceramics: In vitro simulated body fluid test and thermodynamic simulation. *Acta Biomaterialia*. (2010). №.6, С. 2797.

DOI: 10.17223/9785946218412/258

ВЫСОКОЭНТРОПИЙНАЯ ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ КЕРАМИКА (Zr, Hf, Nb)C

³Ван Дакунь, ¹Бурлаченко А.Г., ^{1,3}Мировой Ю.А., ^{1,2,3}Буяков А.С., ⁴Дудина Д.В.

⁴Есиков М.А., ^{1,2,3}Кульков С.Н., ^{1,2,3}Буякова С.П.,

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск);

²Национальный исследовательский Томский государственный университет;

³Национальный исследовательский Томский политехнический университет;

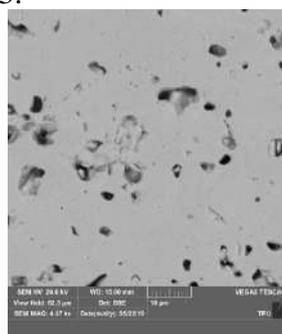
⁴Институт гидродинамики им М. А. Лаврентьева СО РАН (г. Новосибирск)

Одно из активно развиваемых в настоящее время направлений исследований в современном материаловедении – получение и изучение свойств высокоэнтропийных твёрдых растворов карбидов, боридов и оксидов металлов. С точки зрения создания новых керамических материалов энтропийная стабилизация многокомпонентных систем является одним из перспективных направлений. Развитие подхода энтропийной стабилизации многокомпонентных твёрдых растворов позволяет получать керамические материалы с новыми эксплуатационными характеристиками, в том числе, в ракурсе сохранения керамикой структуры и состава в условиях высоких температур.

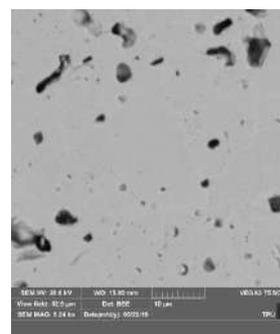
Целью настоящей работы являлось получение высокоэнтропийного твёрдого раствора в системе (Zr, Hf, Nb)C, изучение структуры и свойств.

Материалом для исследований служили образцы высокоэнтропийного твёрдого раствора (Zr, Hf, Nb)C, полученные из порошков ZrC, HfC и NbC в эквимольном соотношении. Приготовление порошковых смесей с их одновременной активацией производилось в планетарной мельнице-активаторе типа АГО в среде аргона в течение 3 минут при частоте вращения барабана 1820 об/мин⁻¹. Образцы высокоэнтропийного твёрдого раствора получены двумя методами: горячим прессованием (hot pressing - HP) порошковых смесей при температуре 2000 °С и давлении 35 МПа в течение 30 минут в атмосфере аргона и спеканием в плазме искрового разряда (spark plasma sintering - SPS) при температуре 2000 °С в течение 5 минут. Твёрдость керамики была определена индентированием пирамиды Берковича с нагрузкой 50 гр. в течение 10 сек. на приборе NanoIndenter G 200.

На рисунке 1 приведена структура образцов керамики (Zr, Hf, Nb)C, полученных HP и SPS методами. Согласно полученным результатам относительная плотность образцов керамики (Zr, Hf, Nb)C, полученных методом HP составила 0,87, а образцов, полученных SPS методом, 0,93.



а)



б)

Рисунок 1 Структура образцов высокоэнтропийного твёрдого раствора (Zr, Hf, Nb)C полученных: а) горячим прессованием; б) спеканием в плазме искрового разряда.

Фазовый состав всех полученных образцов был представлен монофазным твердым раствором замещения (Zr, Hf, Nb)C с ГЦК решеткой. Твёрдость образцов (Zr, Hf, Nb)C, полученных методом HP составила 26,3 ГПа, SPS методом, 34,6 ГПа.

Работа проводилась в соответствии с Программой фундаментальных научных исследований Государственных академий наук на 2013-2020 годы (программа III.23.2.3).

DOI: 10.17223/9785946218412/259

ФОРМИРОВАНИЯ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ КОМПОЗИЦИЙ С ИЕРАРХИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ ИЗ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ ФОРМЫ

Бледнова Ж.М., Русинов П.О.

Кубанский государственный технологический университет, Краснодар

Наблюдающийся в настоящее время стремительный мировой рост исследований высокоэнтропийных материалов (ВЭМ) объясняется их высокими прочностными свойствами по сравнению с традиционными материалами в условиях температур от криогенных до повышенных, высокой усталостной и ударной прочностью, стойкостью к истиранию и широкими функциональными возможностями, среди которых экспериментально подтвержденный термически, деформационно- и магнитно-управляемый эффект памяти формы (ЭПФ) [1]. Недавно учеными института материаловедения НАН Украины (2013-2015 г.) было обнаружено [2], что для высокоэнтропийного сплава $Ti_{16.66}Zr_{16.67}Hf_{16.66}Co_{10}Ni_{25}Cu_{15}$ мартенситные превращения сопровождаются эффектом памяти формы с полным восстановлением при повышенных температурах, что дает основание рассматривать ВЭС $TiZrHfCoNiCu$ перспективными для поверхностного модифицирования. Привлекательность этих материалов для технических применений объясняется их многофункциональностью, как при нормальных, так и при повышенных температурах: высокой демпфирующей способностью, сверхэластичностью. Высокоэнтропийные сплавы проявляют исключительное сопротивление к росту зерен, что позволяет получать наноструктурированные слои на их основе.

Ранее нами разработаны и реализованы технологии формирования многослойных наноструктурированных поверхностных композиций из трех- и четырехкомпонентных материалов с ЭПФ с иерархической структурой с градиентом свойств и фазовых состояний для повышения эксплуатационных свойств и жизненного цикла изделий [3]. Для формирования поверхностных композиций из ВЭС-ов наиболее эффективны комплексные высокоэнергетические способы обработки. Нами использовалось технология высокоскоростное газопламенное напыление (ВГН) механически активированных порошков ВЭС-ов, а в случае повышенных требований к износу и сроку службы в сочетании с высокоэнтропийной керамикой (ВЭК), в том числе с эффектом памяти формы. В табл. 1 приведены результаты рентгеноструктурного и электронномикроскопического исследования пяти вариантов поверхностных слоев из ВЭС-ов $CoCuTiZrHf$, $NiCoTiZrHf$, $NiCuTiZrHf$, $ZrCuNiCoTi$, $TiNiZrHfCoCu$. Все покрытия содержат в различных комбинациях 5-6 металлов Ti, Ni, Zr, Hf, Co, Cu, которые исследованы нами ранее в составе трехкомпонентных и четырехкомпонентных ($TiNiCu$, $TiNiCo$, $TiNiZr$, $TiNiHf$, $TiNiHfCu$). Оценка размеров зерен показала, что структура покрытий, в основном, ультрамелкозернистая 100-400 нм, в некоторых слоях наноразмерная, менее 100 нм, фазовый состав характерный для материалов с ЭПФ, содержит фазы B2, B19.

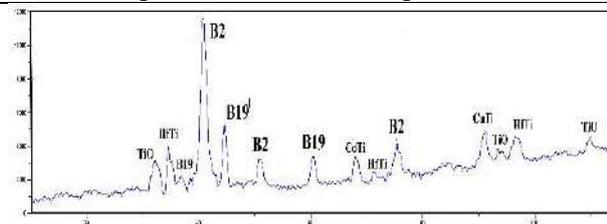
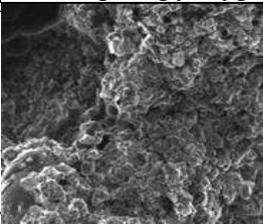
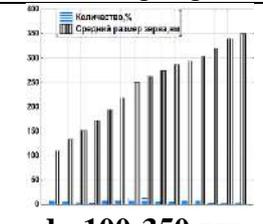
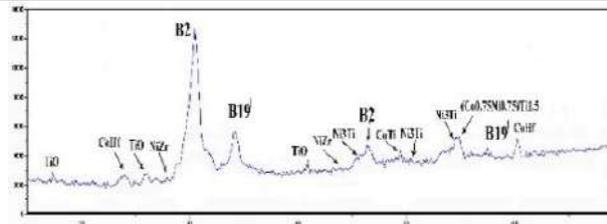
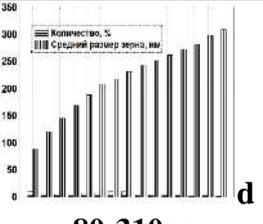
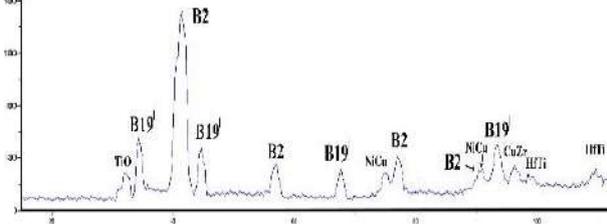
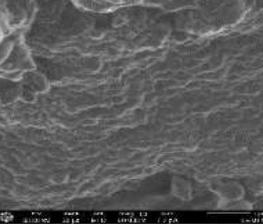
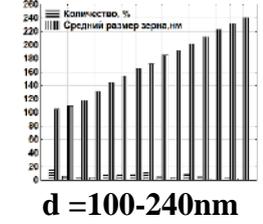
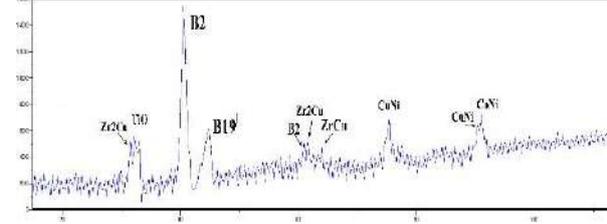
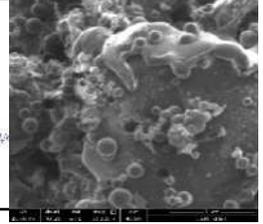
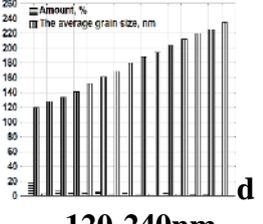
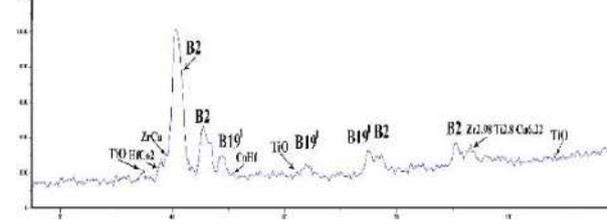
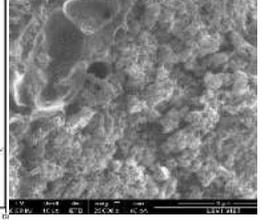
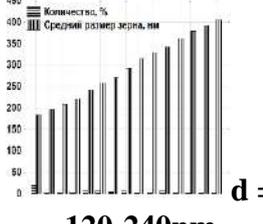
Для прогнозирования деформационного поведения (накопления повреждений и разрушения) поверхностных слоев из высокоэнтропийных материалов с ЭПФ использовался энергетический критерий, основанный на аналогии деформирования, разрушения и плавления, основными параметрами которого является энергоемкость материала и структурный фактор сплава. Расчет энергоемкости многокомпонентных систем из материалов с ЭПФ осуществлялся по результатам рентгеноструктурного анализа с учетом термодинамических характеристик и диаграммы состояния систем. Структурный фактор сплава определялся на основе количественного анализа методом мультифрактальной параметризации структуры. Для приведенных в табл. 1 ВЭС-ов выполнен расчет повреждаемости, показывающий удовлетворительную сходимость с экспериментальными результатами усталостных испытаний образцов с поверхностным слоем из ВЭС-ов с ЭПФ.

В статье рассмотрен принцип формирования многофункциональных поверхностных

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

композиций «основа – адгезионный слой – интеллектуальный слой из многокомпонентных материалов с ЭПФ - функциональный защитный и износостойкий слой из ВЭЖ», реализованных на запатентованном оборудовании в защитной среде (пат. № 2475567, 2502829, 2402628).

Таблица 1. Результаты исследования покрытий из высокоэнтропийных материалов с ЭПФ

Рентгенограмма слоя из материала с ЭПФ	Микроструктура	Размер зерна
 <p>Co17.6Cu18.8Ti9.6Zr18.3Hf35.7 × 80000</p>		 <p>d = 100-350 nm</p>
 <p>Ni17.8Co17.7Ti9.8Zr18.6Hf36, × 65000</p>		 <p>d = 80-310 nm</p>
 <p>Ni17.6Cu18.8Ti9.6Zr18.3Hf35.7 × 80000</p>		 <p>d = 100-240 nm</p>
 <p>Zr52.8Cu26Ni8.8Co8.4Ti4 × 25000</p>		 <p>d = 120-240 nm</p>
 <p>Ni17.8Co17.7Ti9.8Zr18.6Hf36,1 × 80000</p>		 <p>d = 120-240 nm</p>

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда по гранту № 19-19-00331.

1. Michael C. Gao, Daniel B. Miracle, David Maurice, Xuehui Yan, Yong Zhang, Jeffrey A. Hawk. High-entropy functional materials. *Journal of Materials Research*. September 2018, pp. 1-18.
2. Firstov G.S., Kosorukova T.A., Koval Y.N., Odnosum V.V. High entropy shape memory alloys. *Mater Today: Proceedings Materials Today: Proceedings 2S* (2015). p.499–504.
3. Blednova Zh.M., Makhutov N.A., Rusinov P.O. Mechanical and tribological properties of “substrate-material” multifunctional composite with shape memory effect. *Inorganic Materials*. 2016. V. 52, 15, pp. 1489-1497.

DOI: 10.17223/9785946218412/260

САМОЗАЛЕЧИВАНИЕ В КЕРАМИКАХ ZrB_2 - ZrC - SiC - ZrO_2

^{1,2}Дедова Е.С., ¹Бурлаченко А.Г., ^{1,2}Мировой Ю.А., ^{1,2,3}Буяков А.С., ^{1,2,3}Буякова С.П.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет

³Национальный исследовательский Томский государственный университет

Некоторые керамические композиты благодаря присущей им высокой температуре плавления, термической стабильности, высоким механическим свойствам, малому удельному весу являются потенциальными кандидатами для использования в конструкциях, эксплуатируемых в условиях термических нагрузок. Однако высокая чувствительность к дефектам, возникающим в процессе эксплуатации, существенно снижает надёжность и долговечность керамических изделий. Создание структурно-фазовых предпосылок для самозалечивания дефектов в высокотемпературных керамиках позволит существенно повысить надёжность и расширить области их использования.

Целью данной работы являлось изучение влияния добавки ZrO_2 на кинетику самозалечивания дефектов в керамических композитах ZrB_2 - ZrC - SiC .

Материалами для исследований служили керамические композиты 60об.% ZrB_2 -15 об.% ZrC -25об.% SiC с добавкой ZrO_2 от 5 до 15 объёмн. %. Композиционные материалы были получены спеканием под давлением 30 МПа при температуре 1900 °С с изотермической выдержкой в течение 10 минут в среде аргона. Фазовый состав композитов анализировался по рентгеновским дифрактограммам, полученным при $CuK\alpha$ излучении. Дефекты в композитах в виде пропилов в среднем глубиной 150 мкм были сформированы алмазным инструментом. Кинетика самозалечивания дефектов в образцах композитов (ZrB_2 - ZrC - SiC)- ZrO_2 изучалась после их нагрева до температур 1200, 1400 и 1600 °С в атмосфере воздуха. Процент самозалечивания (H) рассчитывался из выражения $H = \frac{L_0 - L_n}{L_0} \times 100\%$, где L - глубина дефектов до и после нагрева [1].

Рентгенофазовые исследования показали, что фазовый состав композитов (ZrB_2 - ZrC - SiC)- ZrO_2 представлен диборидом циркония, карбидом кремния, карбидом циркония и оксидом циркония в тетрагональной модификации.

Исследования показали, что нагрев до температуры 1200 °С привел только к частичному самозалечиванию дефектов композитов всех составов. Однако процент самозалечивания дефектов в образцах композита ZrB_2 - ZrC - SiC не превышал 50 %, а для композита с содержанием 15 % диоксида циркония он составил 80 %. Увеличение температуры нагрева до 1400 °С не привело к значительному увеличению процента самозалечивания композита ZrB_2 - ZrC - SiC . В композитах с добавкой ZrO_2 процент самозалечивания дефектов составил около 100 %. При нагреве керамических композитов до температуры 1600 °С для всех составов композитов ZrB_2 - ZrC - SiC - ZrO_2 произошло полное самозалечивание дефектов. Согласно результатам рентгеновских исследований на поверхности композитов при полном самозалечивании присутствовали только оксидные фазы.

1. Pei R. Crack healing behavior of Cr_2AlC MAX phase studied by X-ray tomography // Journal of the European Ceramic Society. 2017. 37. Pp. 441 – 450

Работа выполнена при в соответствии с Программой фундаментальных научных исследований Государственных академий наук на 2013-2020 годы (программа III.23.2.3) и при частичной поддержке проекта Российского научного фонда № 18-72-00057 (30.07.2018 г)

DOI: 10.17223/9785946218412/261

СТРУКТУРА КОМПОЗИТОВ TiC-TiNi, ПОЛУЧЕННЫХ СПЕКАНИЕМ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

¹Деркач Е.А., ^{1,2,3}Буякова С.П.

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

³Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Несмотря на то, что исследованию структуры и свойств композиционных материалов TiC-TiNi посвящено большое число работ, интерес к этим композитам продолжает только возрастать.

В работе рассматривается влияние соотношения компонентов в композитах TiC-TiNi, полученных спеканием под давлением на их структуру. Исследуемые образцы композитов получали при температуре $0,7 T_{пл}$ в среде аргона при изотермической выдержке 15 минут и давлении прессования 30 МПа.

С увеличением содержания карбида титана от 30 до 70 объёмн. % в исходной порошковой смеси имело место увеличение пористости в спеченных композитах TiC-TiNi в среднем от 2 до 9%. Фазовый состав композитов при содержании TiC более 60% наряду с карбидной фазой представлен соединением Ni₃Ti.

В таблице 1 приведены результаты расчётов областей когерентного рассеяния (ОКР) и микроискажения решеток для фаз TiNi и Ni₃Ti по уширению рентгеновских рефлексов. Согласно полученным данным размеры ОКР TiNi уменьшались с уменьшением его объемной доли в композите. Величина ОКР и микродисторсия ячейки TiC не зависели от его содержания в композите. Размеры ОКР фазы, образовавшейся в процессе спекания (TiNi₃), составили в среднем 20 нм, при незначительном искажении решетки.

Таблица 1. Значения ОКР и дисторсии исследуемых фаз.

Соотношение TiC/TiNi	TiNi		Ni ₃ Ti	
	ОКР, нм	ε	ОКР, нм	ε
30/70	26,652	0,0040	-	-
40/60	24,573	0,0043	-	-
50/50	20,103	0,0053	-	-
60/40	-	-	20,492	0,0048
70/30	-	-	21,533	0,0046

Таким образом, проведенные исследования показали, что уменьшение объемной доли никелида титана в составе композита приводит к уменьшению его размеров ОКР и увеличению микроискажения решетки.

DOI: 10.17223/9785946218412/262

**ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ КОРРОЗИИ
КРИОКАТАНОГО И СОСТАРЕННОГО АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА**

Крымский С.В., Ильясов Р.Р., Пинегина А.А., Автократова Е.В.,
Ситдииков О.Ш. Маркушев М.В.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа

Исследовали влияние криопрокатки и режимов старения на параметры электрохимической коррозии алюминиевого сплава Д16. Материалом исследования служил промышленный горячепрессованный пруток \varnothing 60 мм сплава стандартного состава (Al-4,4Cu-1,4Mg-0,7Mn, вес.%), имевший грубоволокнистую микроструктуру. Заготовки в виде пластин толщиной 5 мм, вырезанные вдоль оси прутка, нагревали до 500°C и после часовой выдержки закачивали в воду для фиксации пересыщенного алюминиевого твердого раствора. Далее сплав прокатывали в изотермических условиях при температуре жидкого азота с суммарной степенью деформации $\epsilon \sim 2$, после чего часть образцов выдерживали при комнатной температуре в течение ~ 6 суток (состояние ЕС), а часть отжигали при температуре 190°C в течение 12 часов (состояние ИС). Аналогично старили образцы после закалки.

Структуру и фазовый состав сплава анализировали методами оптической и просвечивающей электронной микроскопии (ОМ и ПЭМ). Микроструктуру изучали с помощью микроскопа Nikon L-150 на механически полированных и протравленных реактивом Келлера шлифах. Тонкую структуру исследовали в электронном микроскопе JEOL 2000EX на объектах, полученных струйной электрополировкой в 30% растворе азотной кислоты в метаноле. Параметры электрохимической коррозии определяли на образцах с размерами рабочей части 7x7x0,7 мм с использованием универсального потенциостата-гальваностата Р-2Х «Элинс» в режиме линейной развертки потенциала от -500 до 600 мВ со скоростью 10 мВ/с, в рабочем растворе 3,5% NaCl + 1% HCl в электрохимической ячейке с разделением рабочего электрода и электрода сравнения электролитическим ключом. С помощью экстраполяции Тафеля из поляризационных кривых определялся потенциал и ток коррозии. В качестве электрода сравнения использовали стандартный хлорсеребряный электрод ЭСр-10101, вспомогательного – стальной пруток.

Металлографический анализ показал, что криопрокатка (КП) не изменила тип исходной грубоволокнистой структуры прутка, увеличив длину и уменьшив толщину волокон. При этом, внутри них сформировалась развитая деформационная структура, состоящая преимущественно из дислокационных ячеек размером 100-200 нм (см. подробнее в [1,2]). Кроме того, после прокатки алюминиевая матрица осталась пересыщенной основными легирующими элементами [2]. Поэтому при последующем вылеживании сплава при комнатной температуре имел место распад алюминиевого твердого раствора с формированием зон Гинье-Престона-Багаряцкого (ЗГПБ). При искусственном же старении при температуре 190°C, в результате одновременного протекания и распада, и статических возврата и рекристаллизации, формировалась смешанная структура, состоящая из областей возврата с полукогерентными пластинчатыми выделениями основной упрочняющей фазы Al₂CuMg и рекристаллизованных областей, с более крупными, компактными некогерентными выделениями упрочняющих фаз Al₂CuMg и CuAl₂. Кроме того, прокатка вызвала механическое дробление крупных частиц первичных фаз и увеличила развитость строчечности их расположения [2].

Установлено, что криогенная прокатка и последующее естественное старение привели к смещению потенциала коррозии в сторону положительных значений потенциала по сравнению с недеформированным и естественно состаренным состоянием (таблица). Это свидетельствовало о сдвиге реакций на поверхности образца в сторону анодного контроля. Вероятной причиной изменения типа реакций было ускорение кинетики распада твердого раствора с образованием ЗГПБ и метастабильных фаз. При этом ток коррозии также немного уменьшился. Такое поведение криокатаного сплава было обусловлено повышением плотности

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

дефектов кристаллического строения, что облегчало диффузию в теле образца. Также вклад в уменьшение тока коррозии могло вносить уменьшение размера и доли избыточных фаз при прокатке.

Таблица. Параметры электрохимической коррозии криопрокатанного и состаренного по различным режимам алюминиевого сплава Д16

Состояние	Потенциал коррозии, мВ	Ток коррозии, мкА/см ²
T	-688	0,768
КП+ЕС (6 суток)	-613	0,707
T1	-844	1,352
КП+ИС (190°C, 12 ч)	-756	0,941

Из таблицы также следует, что искусственное старение недеформированного сплава (T1) значительно сдвинуло потенциал коррозии в сторону отрицательных значений по сравнению с состоянием T, а также почти двукратно увеличило ток коррозии. Такое электрохимическое поведение сплава вероятно вызвано выделением и формированием менее дисперсных и когерентных матрице упрочняющих фаз, чем при естественном старении.

Электрохимическое же поведение криокатаного и искусственно состаренного сплава характеризовалось более положительным потенциалом коррозии и меньшим током, чем в недеформированном сплаве. Сдвиг потенциала коррозии в сторону положительных значений вероятно обусловлен установленным ранее фактом ускорения и изменения стадийности распада пересыщенного твердого раствора в сильно нагартованной матрице [3]. А именно, выделением наряду с упрочняющей Al_2CuMg фазой, являющейся анодом по отношению к матрице, фазы $CuAl_2$, катодной относительно матрицы. Таким образом, причиной сдвига потенциала являлось изменение фазового состава, вызванного формированием при криопрокатке сильно нагартованной матрицы. Уменьшение же тока коррозии связано с процессом рекристаллизации, приведшем к увеличению доли нанометрических зерен, подавлению формирования и уменьшению ширины зон, свободных от выделений, а также изменению морфологии продуктов распада.

1. Krymskiy S.V., Avtokratova E.V., Markushev M.V., Murashkin M.Yu, Sitdikov O.Sh. Structure and strength of cryorolled and heat treated 2xxx aluminum alloy // Materials Science Forum. 2011. V. 667-669. P. 925-930.
2. Автократова Е.В., Крымский С.В., Маркушев М.В., Ситдииков О.Ш. Особенности структуры алюминиевого сплава Д16, интенсивно деформированного при температуре жидкого азота // Письма о материалах. 2011. Т. 1. № 2. С. 92-95.
3. Крымский С.В., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В. Твердость криопрокатанного и искусственно состаренного алюминиевого сплава Д16 // Письма о материалах. 2012. Т. 1. № 5. С. 45-48.

Работа выполнена при поддержке Министерством науки и высшего образования Российской Федерации по государственному заданию ИПСМ РАН № АААА-А19-119021390107-8 (анализ микроструктуры) и Российского научного фонда (РНФ) в рамках гранта № 16-19-10152-П (электрохимические испытания). Экспериментальные исследования выполнены на базе ЦКП ИПСМ РАН.

DOI: 10.17223/9785946218412/263

**ИЗУЧЕНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО РАЗРУШЕНИЯ
ПРОМЫШЛЕННОЙ НИЗКОУГЛЕРОДИСТОЙ ТРУБНОЙ СТАЛИ ДЛЯ
СОВРЕМЕННЫХ ГАЗОПРОВОДОВ**

Деревягина Л.С., Гордиенко А.И., Сурикова Н.С.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Низкоуглеродистые малолегированные стали с высокой прочностью и низкотемпературной вязкостью разрабатываются давно и широко используются в разнообразных приложениях, таких как кораблестроение, в строительстве зданий и морских сооружений, а также при производстве газо- и нефтепроводов, работающих в суровых климатических условиях Северных регионов. С целью обеспечения безопасности энергосбережения и снижения веса изделий спрос на улучшенные свойства стали постоянно растет. Оптимальное сочетание прочности и вязкости стали достигается не только изменением химического состава, но и совершенствованием термомеханических обработок (ТМО), обеспечивающих в ходе фазовых превращений однородную дисперсную структуру. Изучение структур после различных ТМО является первостепенной задачей, позволяющей выявить ключевые факторы, обеспечивающие требуемый комплекс свойств.

Целью настоящей работы является изучение микроструктуры и характера низкотемпературного разрушения промышленной трубной стали газопровода «Сила Сибири», являющегося основной магистралью Якутского и Иркутского центров газодобычи и транспортировки.

Исследуемая низкоуглеродистая сталь категории прочности К60 (X70) имела следующий химический состав, % (масс.): 0.055 С; 1.59 Mn; 0.073 Si; 0.025 Cr; 0.187 Ni; 0.005 V; 0.019 Ti; 0.047 Nb; 0.12 Cu; 0.0043 S; 0.0062 P; 0.003 N. Заготовки трубной стали были поставлены после контролируемой прокатки с окончанием прокатки в (γ - α)-области с последующим ускоренным охлаждением. Ускоренное охлаждение проводили до температур бейнитного превращения с последующей выдержкой для протекания бейнитного превращения, после этого охлаждение проводили на воздухе.

Исследования структуры проводили методами оптической (микроскоп марки Zeiss Axiovert 25) и растровой микроскопии (РЭМ, микроскоп Philips SEM 515), системы с электронным и сфокусированным ионным пучками Quanta 200 3D с приставкой NORDLYS Oxford Instruments HKL Technology для автоматического анализа дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD), а также просвечивающей электронной микроскопии (ЭМ, микроскоп HT-7700 (Hitachi)). Для оценки уровня механических свойств стали проводили испытания на статическое растяжение образцов в форме двойной лопатки с размерами рабочей части 15×3×1 мм на установке типа Поляни. Ударные испытания на изгиб стандартных образцов 10×10×55 мм с V-образным надрезом проводили на маятниковом копре INSTRON MPX 450 в диапазоне $T_{исп}$ от +20°C до -70°C.

По данным оптической металлографии микроструктура стали представляла собой смесь ферритных, бейнитных зерен и областей вырожденного перлита. Средний размер ферритных зерен равнялся 4.5 мкм, а бейнитных 1-1.5 мкм. Объемная доля перлита составила 6%. По данным EBSD-анализа доля большеугловых границ зерен в структуре равнялась 81%, а доля малоугловых границ – 19%. Из анализа прямых и обратных полюсных фигур обнаружено, что в структуре прокатанного прутка стали К60 в плоскости прокатки содержатся ориентировки кристаллографических плоскостей {001} и {112}, а направление прокатки совпадает с направлением близким к $\langle 110 \rangle$.

Результаты ЭМ показали, что в ферритных зернах увеличена плотность дислокаций, внутри зерен присутствуют мелкодисперсные частицы карбида Nb₂C размерами 5-10 нм. В промежутках между ферритными зернами расположены бейнитные зерна, которые имеют неравноосную форму, однако реечной структуры не выявлено (рис.1, а). Это позволяет заключить, что формируется гранулярный бейнит. Особенностью бейнитных зерен является

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

присутствие на некоторых их границах участков остаточного аустенита (рис. 1, в). Объемная доля аустенита мала и составляет 1-2%. Аустенитные области представляют собой небольшие квазиравноосные области шириной 100-300 нм, а также вытянутые пластины шириной 50-60 нм, длиной до 1000 нм (рис. 1, г). В структуре также обнаружены отдельные частицы Fe_3C размерами 20-50 нм и карбиды Fe_2C и Mn_7C_3 (рис. 1, б).

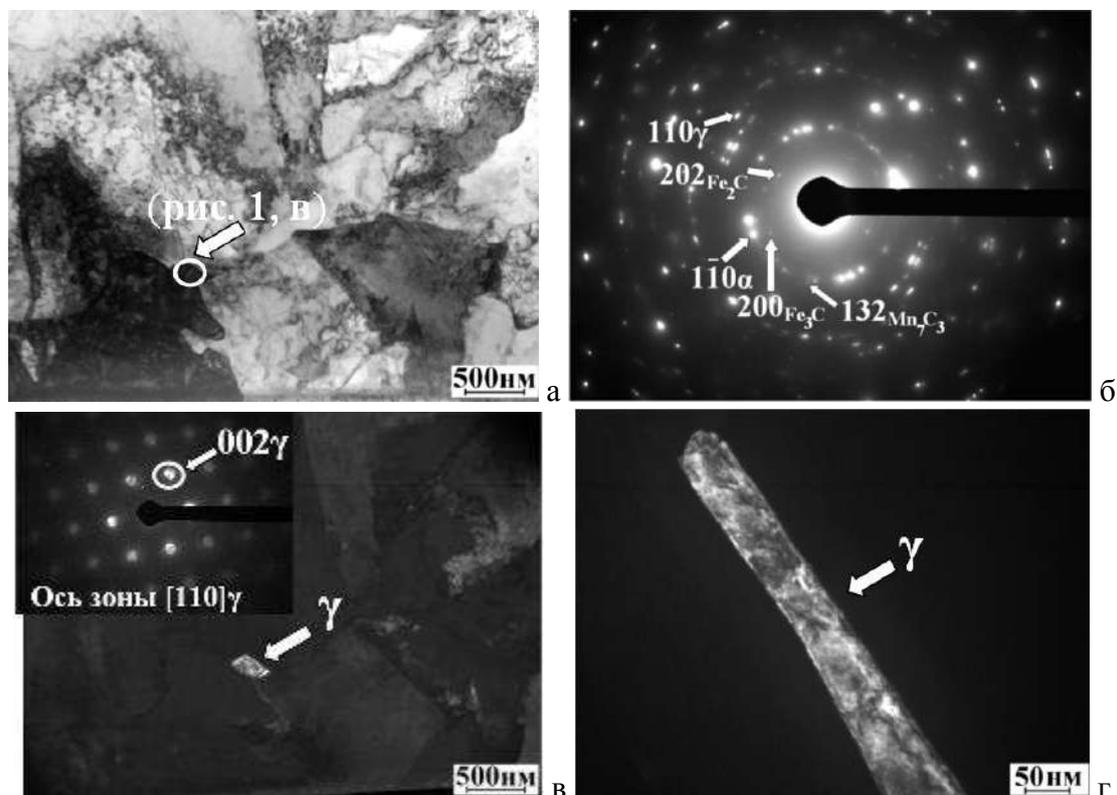


Рис. 1. Электронно-микроскопические изображения структуры стали К60: светлопольное изображение (а), соответствующая микродифракционная картина (б): обозначены рефлексы зоны $[111]\alpha$, стрелкой указаны рефлексы $\langle 110 \rangle \gamma$; $\langle 132 \rangle \text{Mn}_7\text{C}_3$, $\langle 200 \rangle \text{Fe}_3\text{C}$, $\langle 202 \rangle \text{Fe}_2\text{C}$; соответствующее темнопольное изображение в рефлексе $\langle 002 \rangle$ от $\gamma\text{-Fe}$ (в) (указан стрелкой); темнопольное изображение в рефлексе $\langle 002 \rangle$ от $\gamma\text{-Fe}$ (г) (другое поле)

Полученная структура обеспечивает требуемые для категории К60 механические характеристики и хорошие показатели ударной вязкости разрушения KCV, хладостойкости (табл. 1). При комнатной температуре испытаний на ударный изгиб величины KCV составляют 400 Дж/см^2 , а при снижении температуры испытаний до $-40 \div -70^\circ\text{C}$ величины KCV снижаются плавно до 310 Дж/см^2 . При всех температурах испытаний характер разрушения вязкий ямочный, без элементов хрупкого разрушения. Температура вязко-хрупкого перехода находится в области температур ниже -70°C .

Таблица 1. Механические характеристики стали К60

	$\sigma_{0.2}$, МПа	σ_B , МПа	ϵ , %	KCV $^{+20^\circ\text{C}}$, Дж/см 2	KCV $^{-40^\circ\text{C}}$, Дж/см 2	KCV $^{-70^\circ\text{C}}$, Дж/см 2	T $_{\text{хв}}$, °C
Сталь К60	540	630	18	400	382	310	Ниже -70

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/264

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ДВУХСЛОЙНЫХ ГРАФЕНОВ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ С НАРУШЕННОЙ СИММЕТРИЕЙ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

¹Мишук Б.Р., ²Решетняк А.А.

²Томский государственный педагогический университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск,

Представлены результаты теоретического исследования влияния различных представлений энергии основного состояния двухслойного графена (билэра) со щелью, зависящей от спиновой $s = \pm h/2$ и долинной ξ переменных в Дираковских К ($\xi=1$) and К' ($\xi=-1$) точках в его квазичастичном спектре на продольную и Холловскую оптические проводимости как АА, так АВ-стекированных графенов на основе подхода температурной квантовой электродинамики в (2+1)-мерном пространстве-времени.

Точные аналитические выражения для оптических проводимостей σ_{\pm} во внешних электрическом (со щелью 50-250 мэВ) и магнитном полях (3-10 Тл) выведены с помощью 4-зонного микроскопического гамильтониана, линейного по ковариантным производным (с потенциалом магнитного поля перпендикулярного листам графена)

$$H = \xi \begin{pmatrix} \Delta_{\xi s} & \gamma_3 v_F \pi / \gamma_0 & \gamma_4 v_F \pi^+ / \gamma_0 & v_F \pi^+ \\ \gamma_3 v_F \pi^+ / \gamma_0 & -\Delta_{\xi s} & v_F \pi & \gamma_4 v_F \pi / \gamma_0 \\ \gamma_4 v_F \pi / \gamma_0 & v_F \pi^+ & -\Delta_{\xi s} & \gamma_1 \\ v_F \pi & \gamma_4 v_F \pi^+ / \gamma_0 & \gamma_1 & \Delta_{\xi s} \end{pmatrix} \text{ for } \Delta_{\xi s} = U + \xi \Delta_T + s U_T + \xi s \Delta \quad (1)$$

дираковского типа (разного для АА и АВ-стекирований с учетом тригонального искажения спектра (γ_3). Полученные по формулам Кубо проводимости [4] уточняют результаты Л.Фальковского [3] для случая энергетической щели $\Delta_{\xi s}$ общего вида (1), включают зависимости от температуры, химического потенциала. Рассмотрены предельный случай постоянного тока и соотношения между σ_{\pm} и углами Керра и Фарадея для композитных систем со слоями из “АВ(АА)-графенов”. Исследовано влияние примесей на величину проводимостей на основе точной функции Грина для 2-зонного гамильтониана АВ-графена. Результаты предсказывают ряд режимов для основных состояний с нарушенной глобальной симметрией относительно унитарной группы U(4) с их реализациями под управлением внешних полей, для использования в нано- и микроэлектронике на основе графеновых устройств.

В частности, мы представляем адаптированные к 4-зонной модели виды основных состояний при выборе той или иной формы щели [6, 7]: *квантовое долинное Холловское состояние* при $\Delta_{\xi s} = U$; *слоиное антиферромагнитное состояние* при $\Delta_{\xi s} = U_T$; *квантовое аномальное Холловское состояние* при $\Delta_{\xi s} = \Delta_T$; *квантовое спиновое Холловское состояние* при $\Delta_{\xi s} = \Delta$, с соответствующими параметрами порядка, составленными из квадратичных комбинаций компонент волновой функции для уравнения Шредингера с гамильтонианом (1). Эти параметры порядка характеризуются тем, что они или сохраняют симметрию относительно обращения времени для основного состояния, как для H (для второго и третьего состояний), или не сохраняют (для первого и последнего состояний). Мы анализируем качественно и количественно устойчивость каждого из состояний, а также их некоторые комбинации для смешанной формы щели, относительно внешних электрических и магнитных полей для выбора способов реализации цифровой формы передачи, хранения данных для запоминающих и передающих элементов на графене.

В случае упругого или неупругого нагруженного двуслойного графена параметры γ_i в гамильтониане модифицируются для учета отклика системы на механическое нагружение, в свою очередь влияющее на электрические проводимости двухслойного графена. Неупругое механическое воздействие учитывает появление дефектов Стоуна-Уэльса, а также дислокаций и их влияние на изменение электро- и теплопроводящих свойств АВ-графена на основе точной

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

матричной функции Грина для квазичастицы (несовпадающей со скалярной электронной функции Грина в металлах).

1. Novoselov K.S., McCann E., Morozov S.V. et al, Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of 2π in bilayer graphene // Nature Physics. 2006. V.2. P.177-180.
2. McCann E. and Koshini M., The electronic properties of bilayer graphene // Reports on Progress in Physics. 2013. V.76. P. 056503.
3. Falkovsky L.A., Magneto-optics of monolayer and bilayer graphene // JETP Letters 2013. V.97. P. 429-438.
4. Gusynin V.P., Reshetnyak A.A., Sharapov S., Transport properties of AB stacked (Bernal) bilayer graphene on and without substrate within 2- and 4-band approximations // AIP Conf. Proc. 2015. V.1683. P. 020070.
5. Reshetnyak A.A., Mischuk B.R., Magneto-optic probes and transport properties of bilayer graphene with general gap energy within 4-band approximations (to be submitted in Phys.Rev.B).
6. Gorbar E.V., Gusynin V.P., Kuzmenko A.B., Sharapov S.G., Magneto-optical and optical probes of gapped ground states of bilayer graphene // Phys.Rev. B, 2012. V. 86. P. 075414.
7. Jia J., Pyatkovskiy P.K., Gorbar E.V., Gusynin V. P., Broken symmetry states in bilayer graphene in electric and in-plane magnetic fields // Phys. Rev. B 2017. V. 95. P. 045410.

DOI: 10.17223/9785946218412/265

ФОРМИРОВАНИЕ ИЕРАРХИЧЕСКОЙ ПОРОВОЙ СТРУКТУРЫ И МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ В МИКРОДУГОВЫХ КАЛЬЦИЙ-ФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЯХ

¹Комарова Е.Г., ^{1,2}Чебодаева В.В., ^{2,3}Хлусов И.А., ⁴Литвинова Л.С., ^{1,2}Шаркеев Ю.П.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский политехнический университет, Томск*

³*Сибирский государственный медицинский университет, Томск*

⁴*Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград*

Несмотря на успехи современного биомедицинского материаловедения, проблема создания «идеальных» имплантатов (матриц, скэффолдов, тканеинженерных конструкций и т.п.), оптимально отвечающих требованиям регулируемой биосовместимости (биоактивности) и биомеханики, до сих пор актуальна. Дизайн искусственных матриц, способных биомиметически (воссоздание структуры) или биоинспирировано (воссоздание функции) воспроизводить клеточное и тканевое микроокружение на основе идей и основных элементов, заимствованных из живой природы, рассматривается как многообещающее направление биоинженерии и регенеративной медицины. Подобная задача может быть решена путем создания новых композиционных 3D-матриц, включающих механически прочную биосовместимую титановую основу и покрытие с развитой морфологией поверхности и объемной поровой структурой на основе биорезорбируемых кальций-фосфатных (КФ) соединений [1,2]. Целью работы был синтез КФ покрытий методом микродугового оксидирования (МДО) на поверхности титана при различных режимах процесса и исследование закономерностей формирования иерархически-организованной структуры и морфологии поверхности, а также фазового и элементного составов покрытий.

Синтез покрытий методом МДО проводили на установке «Micro-arc 3.0» в импульсном анодном потенциостатическом режиме на образцы из титана марки ВТ1-0. Электролит-суспензия содержал химически чистые соединения: H_3PO_4 (30-% водный раствор), CaCO_3 (90 г/л) и $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (наноразмерный гидроксиапатит (ГА), 60 г/л). Нанесение покрытий проводили при следующих параметрах: длительность импульсов – 100 мкс, частота – 50 Гц, длительность синтеза – 10 мин [3]. Величину импульсного напряжения варьировали от 200 до 300 В.

Методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) показано, что КФ покрытия характеризуются сложной иерархически-организованной поровой структурой: на границе с подложкой расположен тонкий плотный оксидный подслоя (TiO_2 анатаз). Затем формируется основной КФ слой, который содержит многочисленные разветвленные поры округлой и эллипсоидной формы с размерами до 15 мкм. Верхний слой представлен структурными элементами сферической формы (сферами) с внутренними порами и порами в межструктурном пространстве. С повышением приложенного напряжения процесса МДО происходит увеличение размера структурных элементов на поверхности покрытий и их частичное разрушение, при этом в разрушенных полусферах формируются скопления кристаллов пластинчатой формы. В то же время, в объеме покрытий поры также увеличиваются в размерах, а в нижних граничных с подложкой слоях формируются локальные «макро-поры» размером 15-30 мкм. Подобные «макро-поры» формируются в местах пробоя «каскада» интенсивных микродуговых разрядов в ограниченной области под действием высокого напряжения (≥ 300 В). Повышение импульсного напряжения сопровождается увеличением интенсивности микродуговых разрядов, в результате чего линейно увеличиваются толщина (40-90 мкм), шероховатость по параметру Ra (2,5-7,5 мкм) и поверхностная пористость (20-35 %) покрытий.

Результаты рентгенофазового анализа (РФА) показали, что покрытия, сформированные при напряжении 200 В, находятся в рентгеноаморфном состоянии, о чём свидетельствует наличие диффузного гало на дифрактограммах в диапазоне углов $2\theta = 20-40^\circ$. С повышением приложенного напряжения до 300 В в покрытиях наблюдается структурно-фазовый переход в

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

аморфно-кристаллическое состояние: наряду с аморфной фазой присутствуют кристаллические фазы дикальцийфосфата (монетит, CaHPO_4) и β -пирофосфата кальция (β - $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$). Данные результаты согласуются с данными просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), свидетельствующими об аморфной микроструктуре в покрытиях, нанесенных при напряжении 200 В, и аморфно-кристаллической микроструктуре с наличием нанокристаллических фаз β - $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$, CaHPO_4 и TiO_2 (анатаз) в покрытиях, полученных при более высоких напряжениях.

Элементный состав КФ покрытий представлен следующими элементами: Ca (4,3-11,4 ат.%), P (14,3-21,1 ат.%), O (52,0-73,4 ат.%), Ti (8,1-17,8 ат.%). При повышении импульсного напряжения количество элементов в покрытиях изменяется. Концентрация Ca увеличивается, содержание Ti уменьшается, а содержание O и P практически не меняется. Повышение напряжения МДО приводит к существенному разогреву электролита в зоне микроплазменных разрядов, в результате чего интенсифицируется процесс осаждения ионов Ca^{2+} из электролита. Повышение концентрации кальция в покрытиях приводит к увеличению соотношения Ca/P от 0,3 до 0,5. Относительно невысокое соотношение Ca/P для всех покрытий, менее 1,0 (для костной ткани и стехиометрического ГА – Ca/P = 1,67, для CaHPO_4 – Ca/P = 1,0), объясняются тем, что в покрытиях наряду с монетитом присутствуют КФ соединения в аморфной фазе, содержащие катионы титана [4].

Таким образом, установлено, что варьирование величины приложенного напряжения МДО при синтезе покрытий позволяет создавать и управлять иерархией поровой структуры, морфологией и геометрией поверхности, структурно-фазовыми превращениями (аморфная фаза \leftrightarrow аморфная фаза/кристаллические фазы β - $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$, CaHPO_4) и элементным составом. Показано, что иерархические КФ покрытия стимулируют *in vitro* дифференцировку мезенхимных стволовых клеток в остеобласты и, напротив, подавляют активность лейкозных клеток линии Jurkat, что может быть перспективным свойством для их применения при онкологии костной ткани. Для оптимизации режимов синтеза покрытий требуются дополнительные исследования гидрофильных свойств покрытий, коррозионной стойкости и скорости резорбции в биологических средах, а также биологических свойств, определяющих физико-химическое и молекулярное взаимодействие с живыми клетками.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Проект № 16-15-10031).

1. Khlusov I., Litvinova L., Shupletsova V., Khaziakhmatova O., Melashchenko E., Yurova K., Leitsin V., Khlusova M., Pichugin V., Sharkeev Yu. Rough titanium oxide coating prepared by micro-arc oxidation causes down-regulation of hTERT expression, molecular presentation, and cytokine secretion in tumor Jurkat T cells // *Materials*. 2018. V. 11. P. 360(18).
2. Litvinova L.S., Shupletsova V.V., Yurova K.A., Khaziakhmatova O.G., Khlusova M.Yu., Slepchenko G.B., Cherempey E.G., Sharkeev Yu.P., Komarova E.G., Sedelnikova M.B., Malashchenko V.V., Melashchenko E.S., Khlusov I.A. Cell-IQ visualization of motility, cell mass, and osteogenic differentiation of multipotent mesenchymal stromal cells cultured with relief calcium phosphate coating // *Doklady Biochemistry and Biophysics*. 2017. V. 476. P. 310–315.
3. Sedelnikova M.B., Komarova E.G., Sharkeev Yu.P., Tolkacheva T.V., Khlusov I.A., Sheikin V.V. Bioactive calcium phosphate coatings on metallic implants // *AIP Conference Proceedings*. 2017. V. 1882. P. 020062(11).
4. Sharkeev Yu., Komarova E., Sedelnikova M., Sun Z., Zhu Q., Zhang J., Tolkacheva T., Uvarkin P. Structure and properties of micro-arc calcium phosphate coatings on pure titanium and Ti-40Nb alloy // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2017. V. 27. P. 125–133.

DOI: 10.17223/9785946218412/266

К ТЕОРИИ НАПРЯЖЕНИЯ ТЕЧЕНИЯ В МУЛЬТИМОДАЛЬНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ АГРЕГАТАХ. ЭФФЕКТ ДИСПЕРСИОННОГО УПРОЧНЕНИЯ

¹Решетняк А.А., ¹Шаркеев Ю.П., ²Чевизович Д.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск,

²Vinca Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Serbia,

Предложенная в работах [1,2,3] теория напряжения течения, в том числе, предела текучести, σ_y , поликристаллических (ПК) материалов при квазистатической пластической деформации (ПД) в зависимости от среднего размера кристаллитов (зерен), d , в диапазоне 10^{-8} м - 10^{-2} м, расширенная для включения зернограницных областей в рамках двухфазных моделей в [4], развита для мультимодального распределения зерен по их размерам в ПК образце. Зависимость основана на статистической модели распределения энергии каждого кристаллита, вначале в случае одномодального ПК материала по квазистационарным энергетическим уровням при пластическом нагружении с наибольшим уровнем, равным энергии максимальной прямолинейной дислокации в рамках дислокационного механизма деформирования, с неизменным фазовым состоянием кристаллитной части при фиксированной температуре. Механизм деформирования основан на порождении зон локализованной деформации (ЗЛП), в которых, при нагружении термо-флуктуационно, нарушена локальная трансляционная инвариантность кристаллической решетки (КР) в данной фазе. Энергетический спектр кристаллита выбран в простом виде - эквидистантно отстоящих энергетических зон (при реализации наиболее вероятного ансамбля дислокаций с одним вектором Бюргерса, b), начиная от нулевой энергии кристаллита без дефектов, E_0 , до уровня с максимальным значением для атомов на оси дислокации, E_N , $N=d/b$. Порция (квант) энергии, необходимая для перехода из одного состояния кристаллита в соседнее, равна энергии единичной дислокации, $\frac{1}{2}Gb^3$, соизмеримой с энергией активации атома в материале при диффузии.

Неравновесный процесс деформирования представлен в виде последовательности равновесных процессов, с учетом малости времени релаксации [1] атомов КР зерна в новые устойчивые состояния в сравнении со значением минимального времени между актами ПД в нем. На участках равновесности при накопленной ПД, ε - вероятности появления любого из возможных дефектов при элементарном акте ПД в момент времени, $t=\varepsilon/\dot{\varepsilon}$, (отсчитываемого от начала собственно неупругой деформации) распределены в соответствии с распределением Больцмана, $P_n(\varepsilon) \sim A(\varepsilon) \exp\left\{-\frac{n}{2}Gb\varepsilon^3/NkT\right\}$, с эффективным значением вектора Бюргерса $b_\varepsilon = b(1 + \varepsilon)$, и постоянным при заданной температуре модулем сдвига G .

Распределение скалярной плотности дислокаций (СПД) в каждом кристаллите, во-первых, приводит к напряжению течения $\sigma(\varepsilon)$ согласно механизму деформационного упрочнения Тейлора, содержащему нормальный [5] и аномальный соотношения Холла-Петча соответственно для крупно- и нанокристаллических зерен. Во-вторых, $\sigma(\varepsilon)$ имеет максимум для напряжения течения при экстремальном среднем размере зерна d_0 :

$$d_0(\varepsilon, T) = b \frac{Gb^3(1+\varepsilon)^3}{2 \cdot 1,59363 \cdot kT}, \quad (1)$$

который имеет порядок 10^{-8} - 10^{-7} м и смещается в область более крупных зерен с уменьшением T и увеличением накопленной ПД ε . В- третьих, температурное поведение $\sigma(\varepsilon)$, и в частности, σ_y , составляет, в совокупности с соотношением (1) так называемый *размерно-температурный эффект* (РТЭ), заключающийся для плотноупакованных зерен одномодального ПК агрегата в увеличении его предела текучести σ_y с ростом T при всех размерах зерен $d < 3d_0$ (т.е. в нанокристаллической области) и обычном уменьшении σ_y при $d > 3d_0$ (о температурной зависимости в нормальном законе Холла-Петча отмечено, например в [6]).

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Продемонстрированы появление и эволюция ячеистых и ячеисто-сетчатых дислокационных субструктур, возникающих при накоплении ПД ввиду меняющейся кривизны КР в зависимости от d . Полученная статистически на основе механических представлений СПД, эквивалентно может быть вычислена в рамках квазичастичной интерпретации для кванта энергии пластической деформации, условно названного *дислоконом* [1,2, 3]. Этот объект в рамках корпускулярно-волнового дуализма Л. Де Бройля является ни чем иным как составной квазичастицей из акустических фононов, испускаемых атомами зерна в ЗЛП. Эти фононы не являются свободными и объединены в дислоконы лишь при неупругом воздействии на КР [2,3] В рамках предложенной статистической теории напряжения течения, достигнуты совпадения теоретических и экспериментальных данных для σ_y , экстремального размера d_0 для материалов с ОЦК (α -фаза Fe), ГЦК (Cu, Al, Ni) и ГПУ (α -Ti, Zr) КР при $T=300K$. Построены деформационные кривые для кристаллической фазы α -Fe с учетом условия разрушения Бэкофена-Консидера [2, 3].

Однофазная модель ПК материала расширена за счет включения разупрочняющей зеренно-границной фазы до двухфазной с интегральным напряжением течения [2, 3,4]:

$$\sigma_{\Sigma}(\varepsilon) = (1 - n \frac{b}{d})\sigma_C(\varepsilon) + (n - m)\frac{b}{d}\sigma_{GB}(\varepsilon, d_{GB}) - m \frac{b}{d}\sigma_P(\varepsilon, d_P), m \leq n$$

$$\sigma_C(\varepsilon, d) = \sigma(\varepsilon) = \sigma_0(\varepsilon) + \alpha m \frac{Gb}{d} \sqrt{\frac{6\sqrt{2}}{\pi} m_0 \varepsilon M(0)} \left(e^{M(\varepsilon) \frac{b}{d}} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}}, M(\varepsilon) = Gb\varepsilon^3/2kT, \quad (2)$$

где $\sigma_C(\varepsilon, d) = \sigma(\varepsilon, d)$ - напряжение для первой (твердой) фазы, основных зерен диаметра d образца, $\sigma_{GB}(\varepsilon, d_{GB})$ и $\sigma_P(\varepsilon, d_P)$ - напряжения для зерен и пор из области ГЗ средних размеров d_{GB} и d_P соответственно, с некоторой постоянной $n \sim 10^0 - 10^2$, учитывающей среднее расстояние между зернами и сильно зависящей от подготовки состояний ГЗ. При $n = m$ вся область второй фазы заполнена порами разных диаметров. На примере α -Fe [1], показано, что теоретический предел прочности, $\sigma_S = 13,27$ ГПа, (недостижимый с учетом критерия Бэкофена-Консидера), при $(d_m, \varepsilon_m) = (40,6nm; 0,2)$ уменьшается в 3,5 раза до $\sigma_S = 3,81$ ГПа при увеличении доли зернограницной мягкой фазы до $m(b/d) = 36\%$. Величина m_0 в (2) является параметром полиэдральности [1,2], который для КЗ-материалов из предела нормального закона Холла-Петча для напряжения течения (2) при $\varepsilon = 0,002$ определяется связью с экспериментально устанавливаемым коэффициентом Холла-Петча $k(\varepsilon)$ [1] в приближении однофазной модели:

$$\sigma(\varepsilon)|_{d \gg b} = \sigma_0(\varepsilon) + k(\varepsilon)d^{-\frac{1}{2}}, k(\varepsilon) = \alpha m G \sqrt{\frac{6\sqrt{2}}{\pi} m_0 \varepsilon b M(0)/M(\varepsilon)} \Rightarrow m_0 = \frac{\pi}{6\sqrt{2}} \frac{k^2(\varepsilon)}{(\alpha m G)^2 \varepsilon b} \frac{M(\varepsilon)}{M_0}. \quad (3)$$

Построены теоретические зависимости Холла-Петча для указанных материалов для разного выбора мягкой фазы от малоугловых до высокоугловых границ с новыми значениями $d_{\Sigma 0}$ экстремальных зерен и максимумов σ_y [3,4]. Показано, что РТЭ сохраняется для малоугловых ГЗ, но с ростом доли мягкой фазы аномальное Т-поведение σ_y исчезает.

Реальные ПК агрегаты получаемые в рамках применения ИПД, неоднородны по размерам зерен в кристаллитной фазе при заданной T . Кроме того, в ПК материалы для дисперсионного упрочнения добавляются частицы других химических элементов. Двухфазная модель, эффективно используется как для случая многомодальности ПК агрегатов (выделяя его, вторую, третью и т.д. моды из зерен второй фазы $(n - m)(b/d)$ в [2]), так и расширяется на случай дисперсионного упрочнения, предложенного модельно в [4] включением “3-й фазы” с членом $\sigma_{dis}(\varepsilon, d_{dis})$ до трехфазной модели с дисперсионным упрочнением и интегральным напряжением:

$$\sigma_{\Sigma dis}(\varepsilon) = (1 - U_{dis}) \sigma_C(\varepsilon) + U_{dis} \sigma_{dis}(\varepsilon, d_{dis}), \quad 0 \leq U_{dis} < 1 \quad (4)$$

с весом U_{dis} , и d_{dis} – средним размером частиц (из других материалов в сравнении с 2-фазным материалом, например, C , Si и т.д.), реализующих упрочнение. Роль σ_{dis} аналогичная роли $\sigma_{GB}(\varepsilon, d_{GB})$ для зерен 2-й фазы, но с собственным модулем сдвига и вектором Бюргерса наиболее вероятных ансамблей дислокаций G_{dis}, b_{dis} . Такое решение не единственно и приемлемо, если дисперсионные частицы не способствуют появлению новой фазы в кристаллитной части.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Ключевым моментом теории, является экспериментальная проверка предсказанного РТЭ. А именно, необходимо верифицировать увеличение экстремального размера зерна $d_{\Sigma 0}(\varepsilon, T)$ с понижением температуры и отдельно с ростом накопленной ПД, ε , с одновременным уменьшением для малоугловых границ зерен максимального значения $\sigma_{\Sigma}(\varepsilon)$. Указанные явления характерны для НК и субмикроскопических образцов и частично были выявлены на образцах сплава α -Ti ВТ1-0 в УМЗ области [7].

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований РАН на 2013-2020гг.

1. Reshetnyak A.A., Statistical approach to flow stress and generalized Hall-Petch law for polycrystalline materials under plastic deformations // e-print - arXiv:1803.08247[cond-mat.mtr-sci].
2. Reshetnyak A.A., Peculiarities of temperature dependence for generalized Hall-Petch law and two-phase model for deformable polycrystalline materials // e-print - arXiv: 1805.08623[cond-mat.mtr-sci].
3. Reshetnyak A.A., On statistical quantized approach to flow stress and generalized Hall-Petch law for deformable polycrystalline materials. Temperature-size effect. (submitted in Phys.Rev.B)
4. Reshetnyak A.A., Sharkeev Yu.P., Two-phase model of the polycrystalline aggregate with account for grain-boundary states under quasi-static deformation // AIP Conference Proceedings. –2018. V.2051-p.020251 – e-print - arXiv:1809.03628[cond-mat.mes-hall].
5. E.O. Hall. // Proc. Roy. Soc.B. 1951. V.64. P.747–753; Petch N.J., //J. Iron Steel Inst. 1953. V.174. P.25–28
6. Panin V.E., Armstrong R.W. Hall-Petch analysis for temperature and strain rate dependent deformation of polycrystalline lead // Phys. Mesomechanics. 2016. V.19. №1. P. 35–40.
7. Курзина И.А., Ерошенко А.Ю., Шаркеев Ю.П. и др. // Материаловедение. 2010. №5. С.49.

DOI: 10.17223/9785946218412/267

ВЛИЯНИЕ ИСХОДНОГО СТРУКТУРНОГО СОСТОЯНИЯ СПЛАВА Ti_{49.3}Ni_{50.7}(АТ.%) НА ПРОЯВЛЕНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ПАМЯТИ ПРИ ДЕФОРМИРОВАНИИ КРУЧЕНИЕМ

¹Жапова Д.Ю., ¹Гришков В.Н., ¹Лотков А.И., ¹Тимкин В.Н., ²Гусаренко А.А.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

Сплавы на основе никелида титана (TiNi) интересны своей способностью проявлять эффекты памяти формы и сверхэластичности. Это обусловлено реализацией термоупругих мартенситных превращений (МП) B2↔B19', где B2 – высокотемпературная фаза, а B19' – моноклинная мартенситная фаза.

Целью данной работы было исследование закономерностей изменения эффектов сверхэластичности и памяти формы, суммарной неупругой и пластической деформации при деформировании образцов сплава Ti_{49.3}Ni_{50.7}(ат.%) в мартенситном, двухфазном и предпереходном состоянии. При охлаждении и нагреве образцы исследованных сплавов испытывали МП B2↔B19'. Температуры начала и конца МП в фазу B19' составляли M_H=252K и M_K=223K, а температуры начала и конца обратного МП в B2 фазу – A_H=258K и A_K=273K. Схема испытаний: образцам при кручении в процессе изотермических циклов «нагружение-разгрузка» задается деформация γ_t , величину сверхэластичности ($\gamma'_{сэ}$) определяли как величину возврата неупругой деформации (в том числе малой деформации Гука) при последующей разгрузке образцов. Разгруженные образцы нагревали через интервал обратных МП до 473K (реализация ЭПФ). Накопленная при данной γ_t пластическая деформация ($\gamma'_{гр}$) соответствует остаточной деформации при завершении формовосстановления в процессе нагрева разгруженных образцов. В каждом последующем цикле γ_t увеличивали (вплоть до разрушения образцов). Температуры деформирования образцов в изотермических циклах «нагружение-разгрузка» составляли: 164K и 204K (мартенситное состояние), 242K (двухфазное состояние B2+B19') и 260K и 281K (предпереходное состояние B2-фазы).

Обнаружено, что при исследованных температурах деформирования максимальное значение суммарной неупругой деформации (сумма вкладов эффекта памяти формы и сверхэластичности) составляет от 17.9% до 19.3%, таблица 1. Соответствующие величины эффектов сверхэластичности и памяти формы меняются незначительно. Отметим, что высокие значения суммарной неупругой деформации наблюдаются на стадии значительного накопления пластической деформации (от 10.8% до 15.2%). Обсуждаются условия и механизмы, обуславливающие наблюдение эффекта сверхэластичности при испытаниях образцов исследуемого сплава в мартенситном состоянии

Таблица 1. Температуры деформирования, максимальные значения суммарной неупругой деформации и соответствующие ей величины эффектов сверхэластичности и памяти формы, заданных и пластических деформаций.

Фазовый состав	T _{деф} , K	$\gamma_{снд}(max)$, %	$\gamma'_{эф}$, %	$\gamma'_{сэ}$, %	γ'_t , %	$\gamma'_{гр}$, %
B19'	164	18,4	12.4	6.0	33.6	15.2
	204	19,2	14.2	5.0	30.2	11.0
B2+ B19'	242	19,3	14.3	5.0	30.1	10.8
B2 в предпереходном состоянии	260	19,1	13.9	5.2	30.0	10.9
	281	17,9	12.0	5.9	30.1	12.2

Примечание: T_{деф} – температура деформирования изотермических циклов «нагружение-разгрузка»; $\gamma_{снд}(max)$ – максимальная величина суммарной неупругой деформации, а $\gamma'_{эф}$, $\gamma'_{сэ}$, γ'_t и $\gamma'_{гр}$ – соответствующие $\gamma_{снд}(max)$ величины эффекта памяти формы и сверхэластичности, заданной и пластической деформации, соответственно.

Работа поддержана Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/268

РАЗРУШЕНИЕ СПЛАВОВ VT1-0 И Zr-1 МАС. %Nb В РАЗЛИЧНЫХ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЯХ ПРИ НАГРУЖЕНИИ В РЕЖИМЕ ГИГАЦИКЛОВОЙ УСТАЛОСТИ

¹Майрамбекова А.М., ^{3,4}Шаркеев Ю.П., ²Наймарк О.Б.,

²Банников М.В., ³Ерошенко А.Ю., ²Оборин В.А.

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь

³Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

⁴Томский политехнический университет, Томск

Прогнозирование долговечности конструкционных материалов и разработка методов ее повышения является важнейшей фундаментальной задачей для широкого круга конструкционных материалов различного назначения. Известно, что материалы в ультрамелкозернистом состоянии обладают более высоким уровнем механических свойств, в частности, сопротивлением к усталостному разрушению и циклической долговечности и др. Поэтому в настоящее время актуальными являются исследования, посвященные влиянию наноструктурного и/или ультрамелкозернистого состояния на процессы разрушения материалов при циклических нагрузках, анализу кривой усталости в широком диапазоне количества циклов нагружения, не только для многоциклового усталости, 10^6 циклов, но и для гигацикловой усталости (10^9 и более циклов нагружения). В работе проведены сравнительные исследования влияния структурного состояния (ультрамелкозернистого, мелкозернистого крупнокристаллического) на усталостную прочность сплавов VT1-0 и Zr-1 мас.%Nb при нагружении в гигацикловом режиме. В исследуемых сплавах ультрамелкозернистая структура была сформирована комбинированным двухэтапным методом интенсивной пластической деформации, который включал многократное абс-прессование и многоходовую прокатку в ручьевых валках с последующим отжигом [2]. Исследуемые образцы подвергались нагружению на ультразвуковой резонансной усталостной машине Shimadzu USF-2000 в режиме гигацикловой усталости при частоте циклических колебаний 20 кГц с коэффициентом асимметрии цикла $R = -1$ [1]. Выявлено, что образцы VT1-0 и Zr-1мас.%Nb в ультрамелкозернистом состоянии показывают более высокие свойства к сопротивлению усталости как при многоциклового, так и гигациклового режимах нагружения. Установлено, что формирование ультрамелкозернистой структуры в VT1-0 и Zr-1мас.%Nb приводит к увеличению предела усталости титана в 1,6 раза, а сплава циркония в 1,7 раза в гигацикловой области (10^9 циклов) по сравнению с мелкозернистым и крупнозернистым состояниями. Методами оптической и растровой электронной микроскопии проведен анализ морфологии поверхности разрушения. Дополнительно исследовали поверхностный рельеф изломов образцов VT1-0 и Zr-1мас.%Nb в различных состояниях методами фрактального анализа с помощью профилометрии высокого разрешения (интерферометр-профилометр New View 5010) для определения характеристик коррелированного поведения многомасштабных дефектных структур, с которыми связано инициирование и рост трещины. Установлены количественные характеристики профиля поверхности разрушения, соответствующие характерным областям: очагу локализации поврежденности (“fish-eye”) и зоне роста очага до размеров трещин, соответствующих кинетике Пэриса. Полученные значения масштабных инвариантов для характерных областей и соответствующие им значения пространственных масштабов использовались для интерпретации кинетики роста переходных режимов от кинетики «малых трещин» к кинетике «трещин Пэриса».

Работа выполнена в рамках Программ фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2017-2020 годы, Программа III.23.2.

1. Oborin V.A., Bannikov M.V., Naimark O.B., Palin-Luc T. Scaling invariance of fatigue crack growth in gigacycle loading regime // Technical Physics Letter. 2010. Vol. 36. №. 11. P. 1061-1063.
2. Sharkeev Yu. P., Eroshenko A. Yu., Danilov V. I. and et. al. Microstructure and Mechanical Properties of Nanostructured and Ultrafine-Grained Titanium and the Zirconium Formed by the Method of Severe Plastic Deformation // Russian Physics Journal. 2014. Vol.56. P. 1156-1162.

DOI: 10.17223/9785946218412/269

ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТОВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ КОЛИЧЕСТВА СЛОЕВ И ИХ УКЛАДКИ

^{1,2}Красновейкин В.А., ¹Дружинин Н.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

В настоящее время углепластиковые композиты широко используются в аэрокосмической отрасли. Созданные из углепластиков конструкции в процессе эксплуатации подвергаются динамическим нагрузкам в широком диапазоне скоростей и частот. Для эффективной и безопасной работы авиакосмической техники составные части из углепластика проектируются с учетом прочностных и динамических характеристик материала, который создается одновременно с изделием. При этом на динамические характеристики изделия (собственные формы и частоты, коэффициенты демпфирования) из композита влияют такие факторы, как состав, структура и конфигурация материала, конфигурация изготовленных из него деталей, вид и интенсивность прикладываемых нагрузок. Таким образом, для оптимизации конфигурации изделия и материала необходимо проведение измерений динамических характеристик в зависимости от вышеперечисленных факторов.

Для проведения исследований особенностей динамических характеристик композиты с различной конфигурацией внутренней структуры подвергались как одиночному, так и периодическому нестационарному воздействию на вибростоле (подавался широкополосный сигнал вида sweep). При этом образцы подвергались каждому виду воздействия при нескольких разных уровнях скорости нагружения. Такой выбор видов и режимов нагружения обусловлен как особенностями эксплуатации элементов авиакосмической техники, так и потребностью в получении как можно более полной информации о динамических характеристиках материалов.

Наиболее энергоемкими являются колебания на первой собственной частоте. Такие колебания появляются при одиночном нестационарном воздействии. В зависимости от конфигурации изделия и материала, меняется их частота, а так же коэффициент демпфирования и чувствительность конструкции к скорости нагружения при данном воздействии. Данное научное исследование выполнено при поддержке Программы повышения конкурентоспособности ТГУ.

Колебания на второй и третьей собственной частоте менее энергоемки, чем на первой. С учетом их более высокой частоты и сложной формы, в конструкции с течением времени могут возникать зоны с локальным повреждением материала вследствие резонанса с последующим разрушением конструкции в местах наибольшей концентрации энергии колебаний. Получить визуализацию этих форм и значения их частот, амплитуд и коэффициентов демпфирования можно воздействуя на конструкцию пакетом частот. Для получения дополняющей информации, в настоящей работе менялась среднеквадратичная скорость нагружения углепластиков. Исследование динамических характеристик углепластиков при данном виде воздействия проведено в рамках ПФНИ ГАН на 2013-2020 годы, направление III.23.

Динамический отклик (виброскорость и амплитуда, частота и форма колебаний) композитов фиксировался методом сканирующей лазерной доплеровской виброметрии. Проведен модальный анализ композитов. На основе полученных данных построены зависимости коэффициентов демпфирования от скорости при разных видах нагружения для выбранных собственных форм и частот колебаний. Так же получены зависимости среднеквадратичной виброскорости образцов композитов от скорости нагружения при различной конфигурации внутренней структуры материала. Установленные зависимости, а также результаты модального анализа пригодны для выработки практических рекомендаций к проектированию компонентов аэрокосмической техники с учетом внутренней структуры.

DOI: 10.17223/9785946218412/270

**ПРИМЕНЕНИЕ ПОРОШКОВЫХ КАТОДОВ Ti-AL, Ti-AL-Si
ДЛЯ ВАКУУМНО-ДУГОВОГО СИНТЕЗА НИТРИДНЫХ ПОКРЫТИЙ.**

¹Прибытков Г.А., ¹Фирсина И.А., ^{1,2}Коростелева Е.Н.,

¹Коржова В.В., ²Степанов И.Б., ³Иванов Ю.Ф.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Исследовательский Томский политехнический университет, Томск

³Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

Формирование износостойких ионно-плазменных покрытий из многокомпонентных тугоплавких соединений (нитридов, карбидов, боридов и т.д.) позволяет увеличить стойкость режущего инструмента с одновременным увеличением скоростей резания. Особый практический интерес для покрытий на инструменте представляют сложные нитриды Ti-Al-N и Ti-Al-Si-N как замена традиционных покрытий из простого нитрида титана. Покрытия такого состава в большинстве случаев формируются при одновременном вакуумно-дуговом испарении титанового и алюминиевого катодов. Из-за низкой температуры плавления алюминия при вакуумно-дуговом испарении генерируется много капельной фазы, ухудшающей качество покрытия, осаждаемого на подложку. Применяют также многокомпонентные катоды, получаемые металлургическим методом (литье) или прессованием порошковых смесей необходимого состава. В связи с этим представляет интерес сравнить характеристики покрытий, осажденных из азотсодержащей плазмы, генерируемой вакуумно-дуговым испарением Ti-Al или Ti-Al-Si катодов, полученных различными способами.

В настоящей работе приведены результаты сравнительных исследований нитридных покрытий, полученных вакуумно-дуговым испарением металлургического (литье) катода, катода, спрессованного из порошков и экспериментального. Экспериментальные Ti-Al и Ti-Al-Si катоды были получены вакуумным спеканием прессовок из смесей порошков Ti и TiAl₃ с кремнием или без него. Покрытия осаждали на предварительно подготовленные образцы - подложки из стали Р6М5 или титана ВТ1-0 на установках, оснащенных тремя вакуумно-дуговыми испарителями с плазменными фильтрами (ПФ) жалюзийного типа и генератором газовой плазмы. Непосредственно перед осаждением покрытия поверхность подложки была дополнительно очищена, активирована и нагрета ионами аргона при напряжении смещения U_{см} ~ -1 кВ. При нанесении покрытий ток дуги варьировали в интервале 25-350 А; ток разряда генератора газовой плазмы 5-20 А, давление газа – до 0,9 Па. На подложки подавали отрицательное импульсное смещение амплитудой до 4,0 кВ с частотой 100 кГц. Продолжительность осаждения в зависимости от тока разряда дугового испарителя и необходимой толщины покрытий составляла 60-180 минут, температуру подложки поддерживали в интервале 400-450 °С. Был выполнен сравнительный структурно-фазовый и элементный анализ, исследованы адгезионные свойства, микротвердость, характеристики трения и износа покрытий с использованием катодов различного типа.

Установлено, что все покрытия содержат нанокристаллические составляющие, обладают сверхвысокой твердостью, износостойкостью, имеют низкий коэффициент трения. Шероховатость поверхности покрытий, осажденных при испарении композиционных порошковых катодов значительно меньше, чем у покрытий, осажденных при одновременном раздельном испарении одноэлементных титанового и алюминиевого катодов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III. 23

DOI: 10.17223/9785946218412/271

СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПОРОШКОВЫХ Al-CR ПРЕССОВКАХ ПРИ НАГРЕВЕ НА ВОЗДУХЕ.

¹Прибытков Г.А., ¹Коржова В.В., ¹Коростелева Е.Н.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Широкое распространение в порошковой металлургии получили методы, совмещающие нагрев с деформацией. В частности, в Новочеркасском политехническом институте Дорофеевым Ю.Г. и его коллегами на протяжении многих лет развивается метод динамического горячего прессования (ДГП). Этот метод включает операции приготовления шихты из металлического порошка или стружки, холодное прессование, кратковременный нагрев прессовок в защитных средах и их допрессовку динамическими нагрузками в закрытых или открытых штампах. При этом в качестве объектов исследований преимущественно служили порошковые материалы на основе железа. Представляет интерес применить подобные методы для порошковых материалов на основе алюминия. Невысокая температура плавления алюминия, его пластичность, и наличие плотной окисной пленки на поверхности частиц позволяют надеяться, что порошковые композиции на основе алюминия можно нагревать на воздухе для последующего горячего уплотнения без существенного окисления компонентов порошковой смеси внутри прессовок. Однако при нагреве прессовок из порошковых смесей необходимо учитывать возможное диффузионное взаимодействие разнородных компонентов, которое может приводить к структурным превращениям и объемным изменениям прессовок [1]. В работе [2] приведены кинетические кривые окисления беспористого алюминия, хрома и отмечено, что заметное окисление алюминия и хрома на воздухе начинается при температурах выше 800°C, поэтому нагрев при 500°C не должен вызывать сильного окисления данных порошков.

В настоящей работе исследованы зависимости привеса и объемных изменений холоднопрессованных образцов с различной пористостью из порошковых смесей алюминия и хрома при нагреве на воздухе при 500°C. Окислению подвергали цилиндрические образцы, диаметром 28 мм и высотой 6 мм, полученные двухсторонним прессованием из механических смесей порошков чистых элементов: алюминия ПА-4 (85% < 100 мкм) и хрома ПХ1М (< 50 мкм). Для получения различной пористости образцов варьировали давление прессования в интервале 100 – 600 кПа. Образцы помещали в муфельную печь, разогретую до 500°C, и вынимали для взвешивания через каждый час выдержки. Удельный привес q (г/см²) рассчитывали делением прироста массы Δm на площадь внешней поверхности цилиндрического образца. Структурные исследования окисленных образцов проводили методами металлографии и рентгеноструктурного анализа.

Зависимость удельного привеса и объемных изменений образцов с различной исходной пористостью от времени выдержки при 500°C приведена на рисунке 1. При времени выдержки до 10 часов удельный привес всех образцов монотонно увеличивается до 1,2 – 2 мг/см² с постепенным замедлением, а объемный рост не превышает 0,6 %. При дальнейшем увеличении времени выдержки скорость привеса и объемного роста резко увеличиваются для всех образцов, кроме образца с максимальной исходной пористостью (26%).

Результаты металлографического исследования структуры прессовок после различной длительности окисления представлены на рисунке 2. После 9 часов окисления микроструктура приповерхностной области представляет собой алюминиевую матрицу с включениями агломератов и отдельных частиц хрома (рис. 2а). Микроструктура в средней части образца (рис. 2б) подобна предыдущей, с тем отличием, что на границах некоторых частиц хрома появляется третья фаза (показана стрелками), более темная, чем частицы хрома. После 15 часов окисления структура образца, становится сильно неоднородной по объему. В центральной части формируется визуально более плотная структура, которая состоит в основном из новой фазы - интерметаллида. Согласно рентгеноструктурному анализу на окисленном в течение 15 часов образце фазовый состав на поверхности и в середине образца

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

различен. На рентгенограммах с внешней поверхности присутствовали только линии алюминия и хрома. В центральной части прессовки основной фазой является интерметаллид $Al_{13}Cr_2$. По нашему мнению, именно фазовое превращение $Al+Cr \rightarrow Al_{13}Cr_2$ является причиной ускоренного объемного роста при больших длительностях выдержки на рис. 1б. Основой для такого утверждения служат известные данные [3] о сильном объемном росте в результате образования интерметаллидов при спекании порошковых смесей алюминия и хрома.

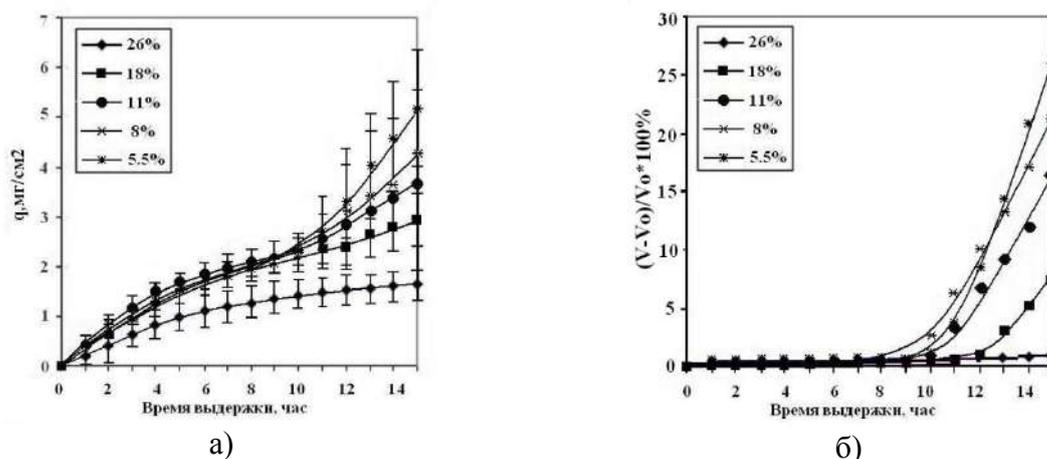


Рис.1 Кинетические кривые окисления при 500°C образцов Al70Cr30 с различной исходной пористостью: а) удельный прирост массы образцов; б) объемные изменения.

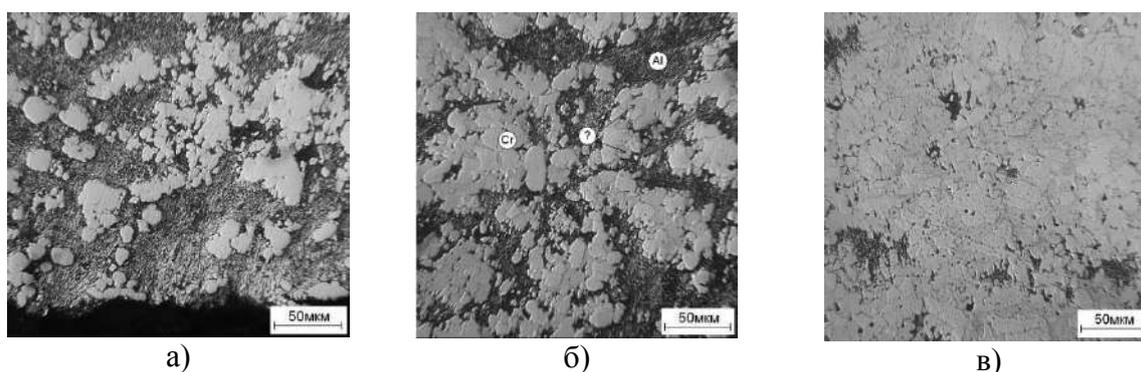


Рис. 2 Микроструктура прессовки состава Al70Cr30 после выдержки на воздухе при 500°C: а) 9 часов, приповерхностная зона; б) 9 часов, середина; в) 15 часов, середина.

При длительном нагреве Al-Cr порошков на воздухе при 500°C не происходит значительного окисления поверхности порошковых материалов. Однако такой температуры достаточно для того, чтобы произошло взаимодействие алюминия с хромом с образованием интерметаллида.

1. Савицкий А.П. Жидкофазное спекание систем с взаимодействующими компонентами – Новосибирск: Наука, 1991. – 183с.
2. Войтович Р.Ф., Головки Э.И. Высокотемпературное окисление металлов и сплавов. Справочник – Киев: Наук. Думка, 1980. – 296с.
3. Романов Г.Н., Тарасов П.П., Дьячковский П.К., Савицкий А.П. Дилатометрические исследования жидкофазного реакционного спекания системы Al-Cr // Известия ВУЗов, Цветная Металлургия. – 2005. – № 5. – С. 60-65.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III. 23

DOI: 10.17223/9785946218412/272

OBTAINING OF HETEROMODULUS ZrC-BASED COMPOSITE MATERIALS, THEIR STRUCTURE AND PROPERTIES

^{1,2}Mirovoy Yu.A., ¹Burlachenko A.G., ^{1,2}Buyakova S.P.

¹Institute of strength physics and material science SB RAS, Tomsk, Russia

²National research Tomsk polytechnic university, Tomsk, Russia

In the present study, the effect of carbon (C) addition on crack resistance of zirconium carbide (ZrC)-based ceramics was investigated. ZrC/C composites are classified as heteromodulus materials as elastic modulus of their components is significantly different [1-2].

X-ray diffractograms of the powders were presented only by ZrC patterns, any impurities were not detected. Coherent scattering region (CSR) was found at 35 nm, which microdistortion at 2.3×10^{-3} . ZrC crystal lattice parameter was found at 4.694 Å which is close to its stoichiometric composition [3-5]. Carbon addition had ambivalent effect on ZrC compaction during hot-pressing. Porosity of ZrC/C composites with concentration of free carbon at 1 and 3 % v./v. was found at $5 \pm 4\%$. Addition of carbon at concentration higher than 3 % v./v. resulted in porosity increase. In case of heteromodulus Zr/C composites with concentration of free carbon of 5 and 10 % v./v. the porosity was found at $18 \pm 4\%$. Obtained results on the compaction during the synthesis of heteromodulus ZrC/C ceramics by hot-pressing show complex effect of C concentration on ZrC sintering behavior. Removal of adsorbed oxygen from the powders particles has positive influence on ZrC compaction at low C concentrations. Increase of the porosity of ZrC/C heteromodulus composites with C concentration more than 3 % v./v. is most likely connected with the decrease of diffusion mass transfer intensity owing to filling of carbon vacancies.

Increase of the carbon concentration was accompanied with the decrease of materials strength and elastic modulus. Vickers hardness (Hv) got down from 15 ± 2 to 5 ± 1 GPa, while elasticity modulus decreased from 330 ± 30 to 200 ± 10 GPa with the rise of C concentration. Calculations of the critical stress intensity factor K_{IC} on length of the crack from Vickers indenter using Niihara formula [6] demonstrated that carbon addition provided increased crack resistance. K_{IC} of ZrC ceramics was found at 4.3 ± 0.2 MPa·m^{1/2}, while crack resistance of ZrC/C composite with C concentration of 3 % v./v. – at 7 ± 0.5 MPa·m^{1/2}. Crack resistance of ZrC/C composite with the highest C concentration (15 % v./v.) was found at 5 ± 0.3 MPa·m^{1/2} and was the least among ones for ZrC/C ceramics. However, this parameter was better than for ZrC ceramic without carbon addition. Crack resistance of the obtained ZrC/C heteromodulus composites is comparable with one for metal matrix composites and in some cases exceeds K_{IC} of multiphase ZrC-based ceramic composites.

The work was supported by the Basic Research Program of SB RAS, project III.23.2.3.

1. Simonenko E. P. et al. Promising ultra-high-temperature ceramic materials for aerospace applications //Russian journal of inorganic chemistry. – 2013. – T. 58. – №. 14. – С. 1669-1693.
2. Sciti D. et al. Spark plasma sintering and mechanical behaviour of ZrC-based composites //Scripta Materialia. – 2008. – T. 59. – №. 6. – С. 638-641.
3. Min-Haga E. et al. Sintering and mechanical properties of ZrC-ZrO₂ composites //Journal of materials science. – 1988. – T. 23. – №. 8. – С. 2865-2870.
4. Schönfeld K. et al. Pressureless sintering of ZrC with variable stoichiometry //Journal of Advanced Ceramics. – 2017. – T. 6. – №. 2. – С. 165-175.
5. Li J. et al. Densification and characterization of hot-pressed ZrC-based composite doped with Nb and CNT //Materials & Design. – 2016. – T. 104. – С. 43-50.
6. Niihara K. et al. Evaluation of K_{IC} of brittle solids by the indentation method with low crack-to-indent ratios //Journal of materials science letters. – 1982. – T. 1. – №. 1. – С. 13-16.

DOI: 10.17223/9785946218412/273

**СЛОИСТЫЙ ТЕПЛОЗАЩИТНЫЙ КЕРАМИЧЕСКИЙ МАТЕРИАЛ
HfC-ZrB₂-SiC-ZrO₂**

^{1,2}Мировой Ю.А., ¹Бурлаченко А.Г., ^{1,2,3}Буякова С.П., ^{1,2}Дедова Е.С., ^{1,2,3}Кульков С.Н.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский политехнический университет, Томск

³Томский государственный университет, Томск

Одной из наиболее амбициозных задач современного материаловедения является создание материалов, способных противостоять воздействию мощных тепловых потоков при температурах эксплуатации вплоть до 2500 °С. Особое место среди перспективных высокотемпературных материалов занимают бескислородные керамические композиционные материалы и покрытия. Их преимущества - низкая удельная масса, высокая температура плавления, химическая инертность, коррозионная стойкость и высокая прочность.

В данной работе представлены результаты исследований по получению и исследованию свойств теплозащитного слоистого керамического материала HfC-ZrB₂-SiC-ZrO₂. Образцы слоистого керамического композита получены спеканием под давлением. Слой из карбида гафния сформирован посредством магнетронного распыления Hf в среде метана. Термоиспытания композиционных материалов HfC-ZrB₂-SiC-ZrO₂ для определения окислительной и абляционной стойкости в высокоэнтальпийном потоке диссоциированного воздуха осуществлялась на установке Плазмотрон ЭДГ-200М в течение 1000 секунд при температуре 2500°С. Прочность образцов керамического композита определялась при диаметральном сжатии на универсальной испытательной машине Instron.

Структурная иерархия слоистого керамического композита выстроена по принципу уменьшения теплопроводности от фронтальной поверхности к тыльной, что призвано обеспечить высокую теплоизоляцию при эксплуатации в кислородосодержащей атмосфере при температуре более 2500 °С. Фронтальная поверхность теплозащитного материала сформирована карбидом гафния (HfC), тыльная поверхность сформирована оксидом циркония (ZrO₂), рисунок 1. Промежуточные слои состояли из ZrB₂, SiC ZrO₂ с разным соотношением компонентов.



Рис. 1 а) структурная схема теплозащитного керамического композита HfC-ZrB₂-SiC-ZrO₂; б) макроснимок образца теплозащитного керамического композита HfC-ZrB₂-SiC-ZrO₂.

Прирост массы при термоиспытаниях составил менее 3%, глубина кратера +0,13 мм. Испытания на прочность слоистого теплозащитного керамического материала HfC-ZrB₂-SiC-ZrO₂ показали, что предел прочности при диаметральном сжатии до термоиспытания составлял 49±4 МПа, после 68±9 МПа. Увеличение предела прочности керамического композита, фиксируемое после термоиспытаний, может быть результатом реализации процессов самозалечивания случайных технологических дефектов и его самовосстановления.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований СО РАН, проекта III.23.2.3.

DOI: 10.17223/9785946218412/274

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ZrO_2 НА УСТОЙЧИВОСТЬ К ТЕРМОУДАРНЫМ ВОЗДЕЙСТВИЯМ

^{1,2}Мировой Ю.А., ¹Бурлаченко А.Г., ^{1,2}Дедова Е.С., ^{1,2}Деркач Е.А., ^{1,2,3}Буякова С.П.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

³Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

Современные материалы, используемые в качестве элементов теплозащиты летательных аппаратов и высокоэнергетических систем, подвергаются значительным тепловым нагрузкам, связанным с резким нагреванием или охлаждением в процессе эксплуатации, то есть термоударам. Среди оксидных керамик привлекает внимание диоксид циркония за счет уникального сочетания аномально низкой теплопроводности и относительно высокой температуры плавления. Стоит отметить, что стойкость керамики к термоударным воздействиям не является имманентным свойством и во многом зависит от структурно-фазового состояния. В связи с этим, важным вопросом является исследование влияния структурно-фазового состояния на стойкость керамики на основе диоксида циркония к термоударным воздействиям.

Цель данной работы заключалась в исследовании влияния термоударных воздействий на структурно-фазовое состояние керамики на основе диоксида циркония и формулировке требований к структурно-фазовому состоянию, обеспечивающему устойчивость к термоударным нагрузкам.

В качестве материалов исследования использовались образцы в форме цилиндров на основе диоксида циркония ZrO_2 , стабилизированного оксидом иттрия Y_2O_3 в тетрагональной модификации. Пористость в керамике варьировалась от 0 до 40 %. Анализ фазового состава осуществлялся по результатам рентгеновских дифрактограмм в интервале углов дифракции $25 - 90^\circ$, полученным при фильтрованном $CuK\alpha$ излучении. Термоударные воздействия осуществлялись посредством охлаждения в воду от температуры $1000^\circ C$.

Результаты рентгеноструктурного анализа показали отсутствие влияния термоударных воздействий на фазовое состояние керамики состава $ZrO_2(Y_2O_3)$: на рентгенограммах наблюдались только характерные пики высокотемпературной тетрагональной модификации диоксида циркония. Рассчитанные величины областей когерентного рассеяния (ОКР) для всех исследуемых образцов керамики состава $ZrO_2(Y_2O_3)$ не показали каких-либо изменений: величины ОКР сохранялись неизменными и составили около 65 нм вне зависимости от числа термоударов.

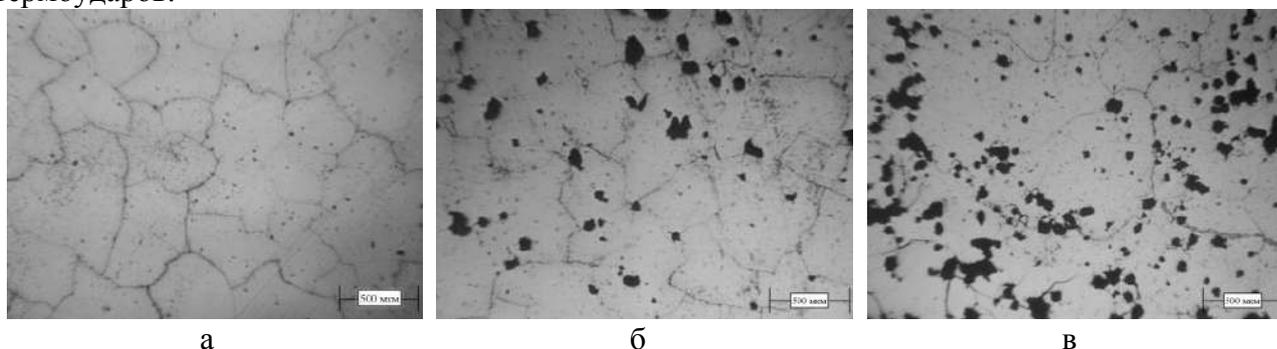


Рисунок 1 – Снимки поверхностей керамики $ZrO_2(Y_2O_3)$, охлаждаемой в воду с пористостью (а) $0 \leq P \leq 10\%$, (б) $10 \leq P \leq 20\%$, (в) $P \geq 20\%$

Микроструктурный анализ полированных поверхностей исследуемых образцов, рисунок 1, показал, что термоударные воздействия приводят к зарождению термических трещин за счет сжимающих напряжений, возникающих в процессе стремительного охлаждения от 1000

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

до 20°C. Дальнейшие термоударные воздействия приводили к распространению трещин и формированию фрагментарной микроструктуры.

Увеличение объема порового пространства приводит к замедлению зарождения и развития трещин и процесса фрагментации, а также уменьшает средний размер элементов блочной микроструктуры. Более интенсивное формирование и распространение термических трещин в высокоплотных образцах керамики, объясняется тем, что поры препятствуют распространению трещины. Важно отметить, что у всех рассматриваемых образцов фрагментация имеет поверхностный характер, в объеме образцов трещин не наблюдается, что обеспечивает сохранение целостности керамики в макрообъеме.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований СО РАН, проекта III.23.2.3.

DOI: 10.17223/9785946218412/275

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООБРАБОТОК НА СТРУКТУРУ, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И НЕУПРУГОСТЬ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА Ti-50,9 ат. % Ni

Полетика Т.М., Гирсова Н.В., Гирсова С.Л., Гришков В.Н., Лотков А.И.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Нанокристаллические (НК) богатые Ni двойные сплавы TiNi, подверженные старению с выпадением дисперсных частиц метастабильной фазы Ti_3Ni_4 , в последнее время привлекают большое внимание благодаря повышенным функциональным свойствам [1]. В то же время недостаточно изученными остаются закономерности образования и роста когерентных частиц Ti_3Ni_4 в условиях наноструктурного состояния материала, а также их влияния на эволюцию микроструктуры и мартенситные превращения. В настоящей работе представлены результаты исследований морфологии и распределения частиц Ti_3Ni_4 в НК сплаве TiNi после термообработок. Изучена взаимосвязь эволюции системы частиц с дислокационными превращениями, реализуемыми в процессе отжигов НК сплава TiNi, а также с мартенситными превращениями и особенностями неупругого поведения.

Для исследований использовали образцы сплава Ti-50,9 ат. % Ni, вырезанные из трубок с внешним диаметром 1,63 мм. В исходном состоянии в B2 фазе сплав Ti-50,9 ат. % Ni имел неоднородную зеренно/субзеренную структуру, характерную для НК материалов после большой деформации прокаткой [2]. Структура включает бездислокационные нанозерна и субмикронных и микронных размеров области слаборазориентированных (до 2°) субзерен, занятых преимущественно сетчатой дислокационной структурой. Средний размер зерен/субзерен составлял 70 нм. Образцы отжигали при температурах $300^\circ C \div 500^\circ C$ с выдержкой 1 час. Характеристические температуры мартенситных превращений определяли по температурной зависимости электросопротивления. Установлено, что как в исходном материале и после отжигов наблюдаются ступенчатые мартенситные превращения $B2 \leftrightarrow R \leftrightarrow B19'$ (Таблица). Структурные исследования проводили методом просвечивающей электронной микроскопии ПЭМ) на микроскопе JEM 2100 (JEOL) в ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ СО РАН. Диаграммы нагружения-разгрузки при растяжении образцов получали при комнатной температуре со скоростью $4 \times 10^{-5} \text{ c}^{-1}$ на испытательной машине

Таблица 1. Температуры мартенситных превращений и характеристик неупругости

T отжига	$T_R, ^\circ C$	$M_s, ^\circ C$	$M_f, ^\circ C$	$A_s, ^\circ C$	$A_f, ^\circ C$	$\sigma_{кр}, \text{ МПа}$	$\epsilon_c, \%$	$\epsilon_{ост}, \%$
исходный	7	-67	-130	-35	-14	440	12	0,1
300 $^\circ C$	34	-42	-152	-6	3	380	8,5	0,3
400 $^\circ C$	39	-29	-78	6	26	260	6,5	6,5
500 $^\circ C$	15	-29	-69	-1	10	270	8,7	5,5

Установлено, что низкотемпературное старение при $300^\circ C$ развивается неоднородно по объему НК материала. В субзеренной структуре происходит образование предвыделений и высокодисперсных когерентных частиц Ti_3Ni_4 сферической формы размером 3-5 нм, характерные рефлексы типа $1/7 \langle 321 \rangle_{B2}$ от которых присутствуют на электронограммах. В нанозернах обнаружить эффектов старения не удалось. Частицы Ti_3Ni_4 выделяются преимущественно на дислокациях, что способствует их блокировке при деформации и эффективному упрочнению B2-аустенита. Сплав после отжига при $300^\circ C$ демонстрирует сверхэластичное поведение. Кривая нагружения-разгрузки имеет «флагообразную» форму с уровнем критических напряжений 380 МПа, широким (до 200 МПа) гистерезисом и остаточной деформацией менее 0,3%. Структурная неоднородность исследуемого НК материала, обуславливает развитие под нагрузкой как $R \leftrightarrow B19'$, так и $B2 \leftrightarrow R \leftrightarrow B19'$ мартенситных превращений, величина суммарной неупругой деформации составляет 8,5%.

Процессы возврата и полигонизации субструктуры при $400^\circ C$ сопровождаются уходом дислокаций в субграницы, которые сохраняют «неравновесный» характер, что характеризует «размытие» ЭМ изображения малоугловых границ [3]. Одновременно в субструктуре

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

интенсивно реализуется старение. Установлено, что когерентные выделения Ti_3Ni_4 размером $5 \div 20$ нм имеют близкую к линзовидной форму. Частицы зарождаются в области дислокационных субграниц и образуют строчки, либо выстроены в ряды, свидетельствующие об автокаталитическом характере зарождения [4]. В нанозернах выделения Ti_3Ni_4 и R-фаза не обнаружены. После отжига при $400^\circ C$ исследуемый сплав находится в двухфазном B2+R состоянии. В субструктуре преобладает механизм зарождения R-мартенсита от межфазных границ частица/матрица, дислокаций и дислокационных границ. При этом для формирующейся R-фазы характерны несовершенная морфология, диспергирование, некристаллографичность. Нагружение материала приводит к неоднородному по объему развитию $B2 \leftrightarrow R$, $R \leftrightarrow B19'$, $B2 \leftrightarrow R \leftrightarrow B19'$ превращений. Деформация при $T < T_R$ не обеспечивает формовосстановление образцов при разгрузке. Кривая нагружения-разгрузки характеризуется снижением уровня критических и остаточной деформацией 5,5%.

Отжиг при $500^\circ C$ обеспечивает процесс рекристаллизации НК сплава TiNi. Механизмом рекристаллизации в субзеренной структуре является процесс коалесценции, который контролируется растворением Ti_3Ni_4 , закрепляющих субграницы [5]. Показано, что миграция малоугловых границ субзерен становится возможной после реализации в границах процесса возврата с формированием упорядоченных дислокационных сеток и растворения частиц Ti_3Ni_4 . Формируются свободные от дислокаций зерна с большеугловыми границами и размерами до 200 нм. Коагуляция некогерентных выделений Ti_3Ni_4 размером до 100 нм происходит на формирующихся равновесных границах и в стыках зерен/субзерен. Укрупнение частиц фазы Ti_3Ni_4 и рост зерен при рекристаллизации снижает эффективность упрочнения B2-аустенита. Реализуется последовательность мартенситных превращений $B2 \leftrightarrow R \leftrightarrow B19'$. Кривая деформации демонстрирует остаточную деформацию 5,5%.

Обсуждаются механизмы взаимосвязи процессов эволюции дислокационной структуры и системы частиц Ti_3Ni_4 в процессе термообработок и их влияние на закономерности эволюции СЭ и ЭФП.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2018-2020 годы, 23.2.3

1. Elahinia M.H., Hashemi M., Tabesh M., Bhaduri S. // Prog. Mater. Sci. 2012. V. 57. P. 911–946.
2. Prokoshkin S., Brailovski V., Dubinskiy S., Inaekyan K, Kreitchberg A. // Shape Mem. Alloys. Shape Mem. and Superelasticity. 2016. V. 2. P. 12-17.
3. Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V. //Prog. Mater. Sci. 2000. V. 45. P. 103–189.
4. Khalil-Allafi J, Dlouhý A, Eggeler G. // Acta Mater. 2002. V. 50. P. 4255-4274.
5. Полетика Т.М., Гирсова С.Л., Лотков А.И., Круковский К.В. // Письма в ЖТФ, 2018, Т. 44. В. 24. С. 3-10

DOI: 10.17223/9785946218412/276

СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ПОВЕРХНОСТИ TiNi СПЛАВА ПОСЛЕ ИОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКИ И ЕЁ ВЛИЯНИЕ НА ПРОЛИФЕРАТИВНУЮ АКТИВНОСТЬ СТВОЛОВЫХ КЛЕТОК

^{1,2} Гудимова Е.Ю., ¹ Шабалина О.И., ^{1,2} Мейснер Л.Л., ³ Иванова Н.М.

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия;

² Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск;

³ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск.

Сплавы на основе никелида титана (TiNi сплавы) являются одними из перспективных материалов для медицины, благодаря своей способности возвращать первоначальную (заданную) форму в результате изменения внешних условий. В зависимости от области применения, металлический материал должен обладать определённым комплексом свойств, который бы позволил достичь высоких параметров биосовместимости и биоинтеграции имплантата в условиях агрессивной среды живого организма. Одной из основных характеристик поверхности, влияющей на формирование клеток и/или тканей в области контакта с имплантатом, является свободная энергия поверхности, величина которой зависит как от топографии поверхности, так и от ее химического состава. Ионно-пучковая обработка, в зависимости от типа имплантируемого иона, может приводить к изменению топографии и физико-химических свойств поверхности. Цель данной работы – изучить изменение свободной энергии поверхности TiNi сплава после ионно-пучковой обработки и её влияние на пролиферативную активность мезенхимальных стволовых клетках костного мозга крысы.

В работе исследовали плоские образцы из сплава на основе никелида титана марки ТН1 (ООО «Промышленный центр МАТЭК-СПФ»). Подготовка исходной поверхности (далее – TiNi) включала в себя: химическое травление в растворе кислот (3 ч. HNO₃ + 1 ч. HF), механическую шлифовку на станке Saphir 550 (ATM GMBH, Германия) до «зеркального блеска» и электролитическую полировку в охлажденном до T = 273 К растворе кислот (3 ч. CH₃COOH + 1 ч. HClO₄). Ионно-пучковую обработку поверхности образцов TiNi сплава ионами тантала с дозой D(Ta) = 6 × 10¹⁷ см⁻² (далее – TiNi-Ta⁺) и кремния D(Si) = 2 × 10¹⁷ см⁻² (далее – TiNi-Si⁺) проводили на установке «Диана-3» (ИФМП СО РАН, г. Томск) в условиях безмасляной откачки и высокого вакуума (~ 10⁻⁴ Па) в режиме высокодозной ионной имплантации.

Измерение краевого угла смачивания θ образцов и расчет свободной энергии поверхности σ производили с помощью прибора для измерения краевого угла «Easy Drop DSA 20» (KRUSS, Германия) и специального программного обеспечения (точность измерения ± 0,1°). Тестовые жидкости – вода и глицерин. Углы смачивания жидкостями на поверхности образцов определяли стандартным методом сидячей капли. Свободную энергию поверхности (СЭП) рассчитывали по методу Оунса – Вендта – Рабеля – Кьельбле (ОВРК). Исследования жизнеспособности мезенхимальных стволовых клетках костного мозга крысы (МСК КМК) в экспериментах *in vitro* проводили в ИХБФМ СО РАН (г. Новосибирск). Подробная методика биологических испытаний описана в работе [1].

В таблице 1 приведены значения краевых углов смачивания θ и свободной энергии поверхности, в том числе полярной и дисперсионной составляющих, для TiNi сплава до и после модификации его поверхности. Согласно полученным данным, краевые углы смачивания водой и глицерином поверхности исходных образцов составляют $\theta_{\text{в}}(\text{TiNi}) = (85,7 \pm 0,93)^\circ$ и $\theta_{\text{г}}(\text{TiNi}) = (74,3 \pm 5,19)^\circ$, соответственно. Свободная энергия поверхности имеет значение $\sigma(\text{TiNi}) = (26,42 \pm 2,50)$ мН/м. Следует отметить, что преобладающей является дисперсионная составляющая СЭП, которая в ~ 3 раза больше, чем полярная. Ионно-пучковая обработка TiNi сплава танталом приводит к незначительному уменьшению краевых углов смачивания при контакте поверхности с тестовыми жидкостями. Значения свободной энергии поверхности образцов TiNi-Ta⁺ близки к значениям для

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

исходного образца TiNi. Однако при данной обработке наблюдается небольшое увеличение полярной и уменьшение дисперсионной составляющих СЭП. После модификации поверхности кремнием наблюдается уменьшение свободной энергии поверхности относительно значений $\sigma(\text{TiNi})$, и перераспределение вкладов дисперсионной и полярной составляющих (таблица 1).

Таблица 1. Значения краевых углов, свободной энергии поверхности (σ), в том числе дисперсионной (σ^D) и полярной (σ^P) составляющих, и оптической плотности биологического раствора с МСК КМК, культивируемые в присутствии образцов TiNi сплава до и после модификации ионным пучком.

Образец	Краевой угол θ , град.		σ , мН/м	σ^P , мН/м	σ^D , мН/м	Оптическая плотность клеток, отн. ед.
	Вода	Глицерин				
TiNi	85,7 ± 0,93	74,3 ± 5,19	26,42 ± 2,50	6,60 ± 0,69	19,82 ± 1,82	0,882 ± 0,231
TiNi-Ta ⁺	83,2 ± 0,71	73,1 ± 0,47	26,69 ± 0,33	8,47 ± 0,13	18,22 ± 0,20	0,926 ± 0,187
TiNi-Si ⁺	82,1 ± 2,21	77,4 ± 0,41	24,04 ± 0,75	13,53 ± 0,42	10,50 ± 0,33	0,956 ± 0,161

Как было показано [2], в результате ионно-пучковой обработки параметры шероховатости поверхности образцов TiNi-Ta⁺ и TiNi-Si⁺ практически не изменяются относительно их значений, полученных для исходного состояния TiNi. В связи с этим, можно говорить о незначительном влиянии топографии поверхности на изменение величины СЭП и её составляющих. В работах [3, 4] был проведен анализ структуры оксидной пленки методом просвечивающей электронной микроскопии. Обнаружено, что в случае ионно-пучковой обработки танталом на поверхности образцов TiNi сплава формируется оксидный слой TiO₂ в фазовых модификациях брукида и рутила, толщиной 20 – 30 нм. В результате модификации ионами кремния на поверхности образцов наблюдается оксидный слой толщиной 10 – 20 нм, включающий в себя нанокристаллиты TiO₂ и SiO₂. На основании данных результатов, причиной перераспределения вкладов от полярной и дисперсионной составляющих СЭП в образцах TiNi-Si⁺, на наш взгляд, является изменение именно структурно-фазового состояния оксидной пленки.

В работе было проведено сопоставление значений оптической плотности биологического раствора с клетками, культивируемые в присутствии образцов, и величины свободной энергии поверхности, в том числе её составляющих. Установлено, что уменьшение СЭП способствует повышению оптической плотности и, как следствие, увеличению пролиферативной активности клеток (таблица 1). Кроме того, увеличение полярной составляющей в образцах TiNi-Ta⁺ (в 1.28 раз) и TiNi-Si⁺ (в 2 раза) относительно значения, полученного для исходного образца TiNi, приводит к повышению значения оптической плотности МСК КМК, культивируемых в их присутствии.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, научное направление III.23.

1. Матвеев А. Л. и др. Влияние поверхностного легирования с использованием тантала или кремния на цитосовместимость никелида титана // Сибирский научный медицинский журнал. 2016. Т. 36. № 1. С. 6–10.
2. Gudimova E.Y. et al. In vitro biocompatibility of the surface ion modified NiTi alloy // AIP Conference Proceedings. 2016. Vol. 1783. №. 1. P. 020071(1–4).
3. Poletika T. M. et al. The structure of the NiTi surface layers after the ion-plasma alloying of Ta // AIP Conference Proceedings. 2015. Vol. 1683. №. 1. С. 020183(1–4).
4. Meisner L. L. et al. The surface layers structure of differently oriented single titanium nickelide crystals subjected to ion implantation // Vacuum. 2016. Vol. 129. С. 126–129.

DOI: 10.17223/9785946218412/277

НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЕ АМОРФНОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ, ИНИЦИИРОВАННОЕ МИЛЛИСЕКУНДНЫМ ТЕПЛОВЫМ ИМПУЛЬСОМ

^{1,2,3}Слядников Е.Е., ¹Хон Ю.А., ^{2,4}Турчановский И.Ю., ¹Каминский П.П.

¹ИФПМ СО РАН, Томск

²ИВТ СО РАН Томск

³ТУСУР, Томск

⁴ТПУ, Томск

Аморфные магнитные материалы нашли широкое применение в электротехнике и радиотехнике в качестве магнитопроводов дросселей, трансформаторов, электродвигателей, экранов для защиты от э/м полей, головок магнитной записи и пр. Уникальными магнитными свойствами обладают аморфные металлические сплавы со структурой, которая имеет вид беспорядочно ориентированных нанокристаллов в магнитной аморфной матрице. Существуют различные способы получения такого структурного состояния. Первый способ состоит в термическом нагреве аморфного материала. Совместные рентгеноструктурные и ЯГР исследования кристаллизации тонкой аморфной пленки сплавов на основе Fe и Co (толщиной 20 – 30 *нм*, шириной 10 *нм*, длиной 30 *нм*) при термическом отжиге в течение 30 – 60 минут показали несколько вариантов изменения структуры. В области температур отжига ниже 500 °С происходит изменение ближнего порядка в аморфном состоянии (структурная релаксация). При температурах отжига от $T_1 \approx 500$ °С до $T_2 \approx 700$ °С образуется нанокристаллическая структура со средним размером зерна около 10 *нм* [1]. Когда температура отжига превышает 700 °С, аморфная структура трансформируется в поликристаллическую структуру со средним размером зерна более микрометра. Для кристаллизации аморфной пленки также используется импульсный отжиг миллисекундной длительности (лазером, электронным пучком, электрической лампой, импульсом тока). При однократном облучении пленки мощным световым импульсом изменение структуры аморфного сплава зависит от его энергии. Если энергии импульса ниже порогового значения ($E \approx 1,1$ *кДж* - пороговая энергия, подводимая к лампе) происходят изменения в его ближнем порядке (структурная релаксация) [2]. Когда энергия импульса превышает пороговое значение ($E \approx 1,3$ *кДж*), формируется поликристаллическая структура со средним размером зерна около микрометра. При облучении аморфной пленки серией из $N = 30$ световых импульсов с энергией меньше пороговой ($E \approx 0,9$ *кДж*) (или условного времени отжига $t = N \cdot t_i$, где $t_i = 0,5$ *мс* - длительность светового импульса) происходит последовательный рост доли нанокристаллической фазы до насыщения [2]. Механизм такого влияния теплового импульса на нанокристаллизацию аморфного материала остается не ясным. По мнению авторов работы [2] механизм кристаллизации при импульсном отжиге миллисекундной длительности такой же, что и при термическом отжиге.

На самом деле, физические условия, в которых протекает кристаллизация термическим отжигом и импульсным отжигом, существенно отличаются. При термическом отжиге тепловой источник имеет объемный характер, процесс кристаллизации протекает медленно и гомогенно, а нанокристаллы возникают по всему объему термофлуктуационным путем. При импульсном отжиге тепловой источник имеет поверхностный характер, глубина проникновения излучения в материал составляет примерно 1 микрометр. Дальнейший прогрев пленки на всю ее толщину осуществляется теплопроводностью, причем время температурной релаксации имеет один порядок с длительностью светового импульса. В условиях поверхностного импульсного нагрева температура поверхности пленки значительно превышает температуру холодной части пленки, поэтому в пленке возникают значительные термонапряжения. Поэтому механизм кристаллизации при импульсном отжиге миллисекундной длительности должен включать помимо термических флуктуаций также атермические флуктуации, инициированные механическими напряжениями.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

В [3] предложена кинетическая модель, выявлены физические причины, условия, механизм и закономерности зарождения и распространения температурного фронта при термоактивированном аморфно-поликристаллическом превращении в аморфной пленке $Ti_{50}Cu_{50}$, инициированном объемным тепловым источником. Показано, что существует температура самопроизвольного поликристаллического превращения T_* , выше которой система становится тепло-неустойчивой. Режим возникновения и распространения превращения волновой и связан с атомными процессами теплопроводности, а механизм явления имеет тепловой характер. При тепловом механизме возникновения и распространения фронта превращения тепло, выделившееся при превращении, теплопроводностью передается на соседние участки не превращенного вещества, нагревает их, и инициирует самоускоряющийся переход. При температурах ниже T_* инициация волнового аморфно-поликристаллического превращения возможно только в случае дополнительного локального нагрева пленки со свободной поверхности.

Целью настоящей работы является формулировка модели и механизма наноструктурирования аморфной металлической пленки при нагреве и термоупругих деформациях, инициированных поверхностным миллисекундным тепловым импульсом. Предлагаемый подход учитывает характерные особенности такого теплового источника: поверхностный характер, кратковременность воздействия теплового источника, высокую интенсивность. Учитывается малоразмерность, сильная неравновесность системы, термодинамические флуктуации параметра порядка, термомеханические напряжения.

Показано, что при малой упругой сдвиговой деформации напряжение подчиняется закону Гука, а при дальнейшем повышении упругой сдвиговой деформации в критической точке происходит скачкообразное изменение ближнего порядка аморфной среды, генерация нанокристаллов, уменьшение сдвиговых напряжений и вязкое течение среды. Когда изменяется ближний порядок аморфной среды, возникают нанокристаллы, внутренняя энергия и упругая энергия превращенного слоя системы понижаются, выделяется скрытая теплота превращения, релаксируют напряжения. Эта выделенная теплота превращения, наряду с пришедшим теплом от поверхностного теплового источника, нагревает следующий слой материала, в котором возникают термонапряжения, что вместе вызывает генерацию нанокристаллов уже в этом слое. Слои, в которых нанокристаллизация завершилась, просто являются проводниками тепла от поверхностного теплового источника к слою, в котором протекает превращение. Так эстафетным образом происходит генерация нанокристаллов по всей толщине пленки, то есть от нагреваемой поверхности движется волна превращения.

Таким образом, механизм нанокристаллизации при импульсном отжиге миллисекундной длительности должен включать помимо термических флуктуаций также атермические флуктуации, инициированные механическими напряжениями.

Работа выполнена по проекту Ш.23.2.8. Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы.

1. Yoshizawa Y., Oguma S., Yamauchi K. New Fe-based soft magnetic alloys composed of ultrafine grain structure // J. Appl. Phys. – 1988. – Vol. 64. – N.10. – P. 6044–6046.
2. Назипов Р.А., Митин А.В., Выжимов Ю.М., Зюзин Н.А., Пятаев А.В. Получение магнитомягкого нанокристаллического состояния в лентах из аморфного сплава FINEMET-типа при облучении лампой-вспышкой // Физика и химия обработки материалов. – 2013. – №6. – С.25-31.
3. Слядников Е.Е., Хон Ю.А., Каминский П.П., Турчановский И.Ю. Зарождение и распространение температурного фронта при кристаллизации аморфного сплава $Ti_{50}Cu_{50}$, инициированной объемным тепловым источником // ЖТФ.–2018.–Т. 88.– В. 3.– С.374–379.

**КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫЕ МИШЕНИ Д
ЛЯ ВЧ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ БИОПОКРЫТИЙ**

^{1,2}Болат-оол А.А., ^{1,2}Просолов К.А., ^{1,3}Химич М.А., ^{1,2}Чебодаева В.В., ¹Уваркин П.В.,
¹Толмачев А.И., ¹Белявская О.А., ^{1,2}Шаркеев Ю.П.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

³*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*
anna_bolat-ool@mail.ru

В настоящее время модификация поверхности имплантатов, используемых в стоматологии и эндопротезировании, перестала быть редкостью. Этап формирования покрытий на поверхности медицинских изделий необходим для защиты прилегающих к имплантату живых тканей в случаях возможного развития металлоза. Накопление ионов металлов в организме может носить токсический характер, даже в случае применения имплантатов из биосовместимых сплавов титана. Проблема развития металлоза часто встречается при износе пары трения [1]. Поэтому необходимо формировать защитные покрытия, обладающие высокой прочностью и достаточной степенью их адгезии к поверхности имплантата. С другой стороны, для ускорения регенерации костной ткани и для минимизации токсических реакций используют покрытия из кальцийфосфатов (СаР).

При производстве имплантатов широко применяются газотермический и электрохимический методы формирования СаР покрытий. Однако методы имеют ряд недостатков, прежде всего низкая адгезия покрытия к поверхности имплантата и риск формирования СаР крошки и отломков покрытия в процессе эксплуатации изделия. Альтернативой этим методам являются методы физического осаждения из паровой фазы (PVD). К методам PVD относятся метод лазерной абляции, метод высокочастотного (ВЧ) магнетронного распыления, метод испарения электронным пучком и др.

Для формирования СаР покрытий из паровой фазы с применением методов вакуумного напыления необходимы мишени для распыления. Форма и размеры мишеней зависят от типа вакуумной установки и могут изменяться в связи с техническими требованиями. Так для формирования покрытий с использованием вакуумной установки с ВЧ магнетронной распылительной системой [2], которая применялась в работе, необходимо решение задачи создания мишени из хрупкого материала, представляющей собой плоский тонкий диск толщиной 3-4 мм большого диаметра, ~ 110 мм, и обладающей прочностью, достаточной для закрепления на катоде.

Для получения мишеней используется процесс спекания – процесс уплотнения и объединения частиц порошка под действием высоких температур, вследствие которого происходит упрочнение материала. Из исследований процессов спекания керамики на основе гидроксиапатита (ГА) известно, что типичными процессами, влияющими на свойства однофазной керамики, являются уплотнение материала за счет сокращения пористости, рекристаллизация и каталитическое действие, оказываемое парциальным давлением паров воды в атмосфере [3]. Выбор режимов спекания ГА керамики осложняется возможной потерей радикалов гидроксильной группы и распадом ГА при высоких температурах на окись кальция, трикальцийфосфат, тетракальцийфосфат, а в вакууме - возможной диссоциацией ГА до образования фазы оксида фосфора (P₂O₅). Известно также, что увеличение размера частиц исходного порошка ГА приводит к значительному повышению температуры начала интенсивной усадки при спекании.

Помимо защитной функции и ускорения процессов остеоинтеграции, СаР покрытия могут обладать антибактериальным эффектом. Для этого часть катионов кальция в кристаллической решетке ГА замещается ионами цинка, меди, серебра и других элементов, наличие которых не дает развиваться инфекции при внедрении имплантата в организм [4]. В нашей работе проведены исследования режимов спекания и исследованы механические

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

свойства мишеней, сформированных методом одноосного прессования из порошков гидроксипатитового состава с частичными замещениями катионов Ca^{+2} в элементарной ячейке кристаллов ГА катионами Zn^{+2} и Cu^{+2} ($\text{Ca}_{9,6}\text{Zn}_{0,4}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (Zn-ГА), $\text{Ca}_{9,8}\text{Cu}_{0,2}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (Cu-ГА)), полученных методом механохимического синтеза с различной удельной поверхностью в диапазоне от 0,7 до 60,0 м²/г.

Определение удельной поверхности порошков выполнялось на анализаторе текстурных характеристик материалов «Сорбтометр М». Для прессования мишеней по схеме одноосного прессования использовали гидравлический пресс МИС-6000.4К (г. Армавир, Россия) и стальные пресс-формы. Мишени спекались в воздушной среде в электропечи ИТМ 12.1200 (ООО «ИТМ», г. Томск), а для спекания мишеней, спрессованных из порошков с малой удельной поверхностью, использовалась вакуумная электропечь типа СГВ–2,4–2/15ИЗ (МЭВЗ, Москва). Фазовый состав спеченных мишеней исследовался на рентгеновском дифрактометре ДРОН-7 в $\text{CoK}\alpha$ -излучении. Элементный состав оценивался методом энергодисперсионной спектроскопии на растровом электронном микроскопе Zeiss Leo Evo 50. Анализ элементного и фазового составов проводился в ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ СО РАН». Микротвердость мишеней измерялась на микротвердомере Duramin 5 (“Struers”, Дания). Нагрузка составляла 50 г при продолжительности нагружения 12 с. Измерения проводились в 10-15 точках на поверхности мишени, выбранных произвольно.

Определено фазовое состояние мишеней нескольких кальцийфосфатных составов, спеченных с использованием различных методов, определены параметры кристаллических решеток. Спекание мишеней несколько изменяет параметры a и c кристаллической решетки относительно параметров исходных порошков, сохраняя объем элементарных ячеек. Показано значительное влияние дисперсности исходных порошков на режимы, обеспечивающие спекание спрессованных мишеней требуемого состава. Определены и построены зависимости микротвердости мишеней от величины дисперсности исходного порошка. Микротвердость для различных типов мишеней может изменяться от 370 МПа до 1630 МПа. Сформированы рекомендации по спеканию мишеней из порошков с различной удельной поверхностью, изменяющейся в диапазоне 0,7 - 60,0 м²/г.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.2. Авторы выражают благодарность сотрудникам ЛФХВМ ИФПМ СО РАН (зав. лаб. д.т.н. Лернер М.И.) за проведение исследований удельной поверхности порошков и д.х.н. Чайкиной М.В. из ИХТТМ СО РАН за подготовку катионозамещенных гидроксипатитов с сопроводительной информацией по результатам исследований.

1. Металлоз, вызванный скользящими титановыми конструкциями, у больных сколиозом / М.Т. Сампиев, А.А. Лака, Д.С. Агзамов, С.П. Балашов, Л.Г. Макинян, А.А. Шевченко, Р.Ф. Каримов, К. Рамлугон // Вестник РНЦПР. 2015. №3. С. 1-19.
2. Glancing Angle Deposition of Zn-Doped Calcium Phosphate Coatings by RF Magnetron Sputtering / К.А. Prosolov, О.А. Belyavskaya, J. Linders, К. Loza, О. Prymak, С. Mayer, J.V. Rau, М. Epple, Yu.P. Sharkeev // Coatings. 2019. V. 9. №4. P. 220. Doi: <https://doi.org/10.3390/coatings9040220>.
3. Баринов С.М., Комлев В.С. // Биокерамика на основе фосфатов кальция. М.: Наука, 2005. 203 с.
4. V. Saxena, A. Hasan, L.M. Pandey // Effect of Zn/ZnO integration with hydroxyapatite: a review // Materials Technology. Advanced Performance Materials. 2017. P. 79-92. Doi: <https://doi.org/10.1080/10667857.2017.1377972>.

DOI: 10.17223/9785946218412/279

МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ БОАКТИВНОГО КОМПОЗИТА ГИДРОКСИАПАТИТ-МУНТ

¹Пономарев А.Н., ^{1,2}Резванова А.Е., ³Барабашко М.С.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск

³Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, Харьков

Проведены исследования твердости по Виккерсу, модуля Юнга, пористости, трещиностойкости и шероховатости биоактивного композита медицинского назначения гидроксиапатит-МУНТ. В этом композите роль биоактивной матрицы выполняет гидроксиапатит (ГА), а улучшение механических свойств достигается за счет добавок примесей многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ).

Установлено, что добавки МУНТ в количестве до 0.5 вес. % приводят к получению композитной керамики с более высокой твердостью по Виккерсу и меньшей относительной пористостью. С помощью прибора «СОРБОМЕТР-М» методом адсорбции-десорбции азота определена удельная поверхности ($S_{ВЕТ}$) образцов. Показано, что наличие добавок МУНТ приводит к получению более твердой и плотной керамике.

Выявлено, что коэффициент трещиностойкости увеличивается с увеличением концентраций МУНТ (рис.1). Это обусловлено, по видимому тем, что с увеличением концентраций МУНТ твердость по Виккерсу растет, а модуль Юнга практически не зависит от концентрации МУНТ. Трещиностойкость композита была рассчитана по формулам (1) и (2):

$$K_c = 0.071 * H * a^{1/2} * \left(\frac{E}{H}\right)^{2/5} * \left(\frac{c}{a}\right)^{-3/2} \quad \left(\frac{c}{a} \geq 2.5\right) \quad (1)$$

$$K_c = 0.018 * H * a^{1/2} * \left(\frac{c}{a}\right)^{-1/2} * \left(\frac{H}{E}\right)^{-2/5} \quad \left(\frac{c}{a} \leq 2.5\right) \quad (2)$$

где E – модуль Юнга, H – твердость по Виккерсу, c – длина радиальной трещины, начинающаяся от угла отпечатка индентора (пирамиды), a – диагональ пирамиды.

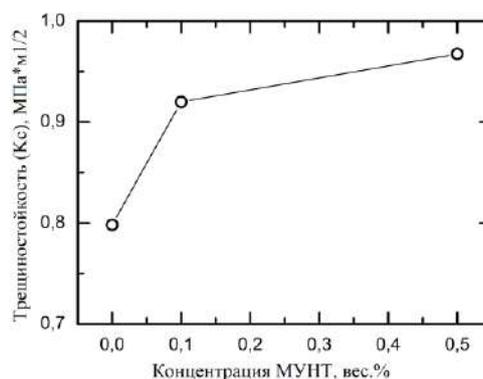


Рисунок 3 - Зависимость трещиностойкости (K_c) от концентраций МУНТ

Исследование шероховатости поверхности композита было проведено с помощью профилометра Zygo New. Установлена зависимость Ra от концентрации МУНТ.

DOI: 10.17223/9785946218412/280

**МИКРОСТРУКТУРА, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ
БИОИНЕРТНЫХ СПЛАВОВ Ti-45 мас. % Nb И Zr-1 мас. % Nb В
УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ СОСТОЯНИИ**

¹Ерошенко А.Ю., ^{1,2}Шаркеев Ю.П., ^{1,3}Химич М.А., ¹Глухов И.А.,

¹Уваркин П.В., ^{1,3}Майрамбекова А.М., ¹Толмачев А.И.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

³*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

eroshenko@ispms.tsc.ru

В работе представлены результаты исследования микроструктуры, фазового состава, механических свойств и термостабильности биоинертных сплавов – Ti-45 мас. % Nb (Ti-45Nb) и Zr-1 мас. % Nb (Zr-1Nb) в ультрамелкозернистом (УМЗ) состоянии со средним размером структурных элементов (зерна, субзерна, фрагменты) не более 0,3 мкм. УМЗ состояние в сплавах получали комбинированным методом интенсивной пластической деформации (ИПД), сочетающим многократное абс-прессование и многоходовую прокатку с последующим дорекристаллизационным отжигом. В УМЗ состоянии сплав Ti-45Nb имел многофазную структуру, представленную субзернами β -фазы, дисперсно-упрочненными наночастицами ω -фазы, и субзернами α -фазы. УМЗ структура сплава Zr-1Nb состояла из структурных элементов матричной фазы α -Zr и частиц второй фазы β -Nb.

Сформированная комбинированным методом ИПД УМЗ структура в сплавах Ti-45Nb и Zr-1Nb обеспечивала высокий уровень механических свойств (микротвердость, пределы прочности, текучести и усталости).

Для УМЗ сплавов Ti-45Nb и Zr-1Nb получены экспериментальные данные по термостабильности структурно-фазового состояния и механических свойств при рекристаллизационных часовых отжигах при температурах соответственно в интервалах 400–800 и 350–580 °С. В интервале отжигов 500–700 °С в сплаве Ti-45Nb происходит трансформация УМЗ структуры в мелкозернистую структуру с фазовым превращением по схеме $\alpha \rightarrow \beta$ и сохранением частиц ω -фазы в объеме субзерен β -фазы. Отжиг УМЗ сплава Zr-1Nb в интервале 500–580 °С способствует значительному росту субзерен циркония с преобразованием УМЗ структуры в мелкокристаллическую структуру без изменения фазового состава.

Исследовано влияние длительного термического воздействия в течение 5–360 часов на структурно-фазовое состояние УМЗ сплавов при 400 °С. С увеличением продолжительности отжигов в УМЗ сплаве Zr-1Nb наблюдается рост субзерен матричной фазы α -Zr и частиц β -Nb. Долговременные отжижки УМЗ сплава Ti-45Nb не оказывают влияния на размер структурных элементов матричной β -фазы, но способствуют заметному росту зерен α -фазы и ω -фазы. Показано, что разупрочнение сплава Zr-1Nb в УМЗ состоянии обусловлено ростом структурных элементов матричной фазы α -Zr и частиц β -Nb, что связано с процессами рекристаллизации, а сплава Ti-45Nb – с ростом наноразмерных зерен α - и ω -фаз и уменьшением их вклада в дисперсионное упрочнение.

Обсуждаются вопросы медицинских приложений биоинертных сплавов на основе титана, ниобия и циркония в УМЗ состоянии с высоким уровнем биомеханических характеристик.

Работа выполнена в рамках Программ фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2017-2020 годы, Программа Ш.23.2.

DOI: 10.17223/9785946218412/281

СТРУКТУРА БЛИЖНЕГО И СРЕДНЕГО ПОРЯДКА В АМОРФНОМ Ti-Ni-Ta ПОВЕРХНОСТНОМ СПЛАВЕ ПОСЛЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА, ИССЛЕДОВАННАЯ МЕТОДАМИ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

¹Семина В. О., ^{1,2}Мухамедова Р. Р., ^{1,2}Мейснер Л. Л., ³Ротштейн В. П.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

³*Томский государственный педагогический университет, Томск*

Получение металлических стекол и аморфно-нанокристаллических композитов является актуальной задачей в инженерных приложениях, в которых важно обеспечить высокий уровень механических и функциональных свойств. Ввиду того, что металлические стекла метастабильны, под действием деформационных или термических воздействий в них могут формироваться нанокомпозитные структуры, обладающие высокой пластичностью. Перспективной представляется возможность управления процессами кристаллизации аморфных сплавов с целью обеспечения в них высокой плотности нанокристаллических частиц (до 10^{24} м⁻³). Макроскопическая пластичность и процессы термически индуцированного охрупчивания в аморфно-нанокристаллических композитах обусловлены структурными изменениями, происходящими в аморфной матрице в процессе нагрева. Целью работы являлось исследование закономерностей изменения структуры ближнего и среднего порядка в аморфном Ti-Ni-Ta поверхностном сплаве при низкотемпературном отжиге на наномасштабном уровне.

Формирование Ti-Ni-Ta поверхностного сплава осуществлялось электронно-пучковым способом на модифицированной установке РИТМ-СП («Микросплав», Россия) по методике, описанной в работе [1]. Отжиг образцов производился в вакууме ($P = 1 \cdot 10^{-5}$ мБар) при температуре 573 К в течение 10 минут с последующим медленным охлаждением в печи. Микроструктурные исследования поверхностного слоя образцов проводились на оборудовании центров коллективного пользования «Нанотех» ИФПМ СО РАН и НИ ТПУ. Электронно-микроскопические исследования в режимах светлого, темного полей, микро- и нанодифракции проводились методом тонких фольг на просвечивающих электронных микроскопах JEM-2100 (JEOL, Япония) и JEM-2100F (JEOL, Япония) при ускоряющем напряжении 200 кВ. Фольги для ПЭМ готовились методом ионного травления на установке EM 09100IS (JEOL, Япония). Анализ нанодифракционных картин осуществлялся методом функций радиального распределения атомов (ФРРА) с помощью программного обеспечения SuePDF software [2]. Состав аморфной матрицы определялся с помощью энергодисперсионного спектрометра INCA Energy (Oxford Instruments, Великобритания), установленного на просвечивающем электронном микроскопе. Для того, чтобы исключить влияние высокочастотного шума на больших углах рассеяния, диапазон векторов рассеяния электронов был ограничен до 12 нм^{-1} . Для калибровки постоянной прибора λL использовали эталонные реплики из золота.

По результатам ПЭМ-анализа установлено, что в исходном состоянии (до отжига) Ti-Ni-Ta поверхностный сплав характеризуется аморфно-нанокристаллической структурой. На нанодифракционных картинах вблизи диффузных гало от аморфной фазы наблюдались менее интенсивные точечные брэгговские отражения от нанокристаллических ($d < 50 \text{ нм}$) частиц β -фазы (Ti, Ta) с ОЦК решеткой. После низкотемпературного отжига при 573 К (10 минут) кристаллизации аморфной фазы не наблюдалось.

Считается, что отжиг аморфных материалов при температурах, лежащих ниже температуры стеклования, сопровождается процессами структурной релаксации. Для исследований структуры ближнего порядка в аморфной матрице до и после отжига были построены ФРРА по данным, как минимум, трех нанодифракционных картин (рис. 1). Из рис. 1 хорошо заметно, что аморфное состояние до и после отжига характеризуется высокой

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

степенью атомного среднего порядка (СП) с характерным радиусом $r_{СП} \sim 12 \div 14 \text{ \AA}$. При этом межатомные расстояния на первой координационной сфере в обоих случаях хорошо аппроксимируются единственной функцией Гаусса и приходятся на $r^1 = 2.80 - 2.86 \text{ \AA}$ (рис. 1). В результате отжига расщепление второго и третьего максимумов вблизи $r^2 \sim 4.85 \text{ \AA}$ и $r^3 \sim 7.30 \text{ \AA}$ становится менее выраженным. Можно предположить, что в процессе структурной релаксации сформировалась более упорядоченная структура атомного среднего порядка, характеризующаяся более плотной упаковкой.

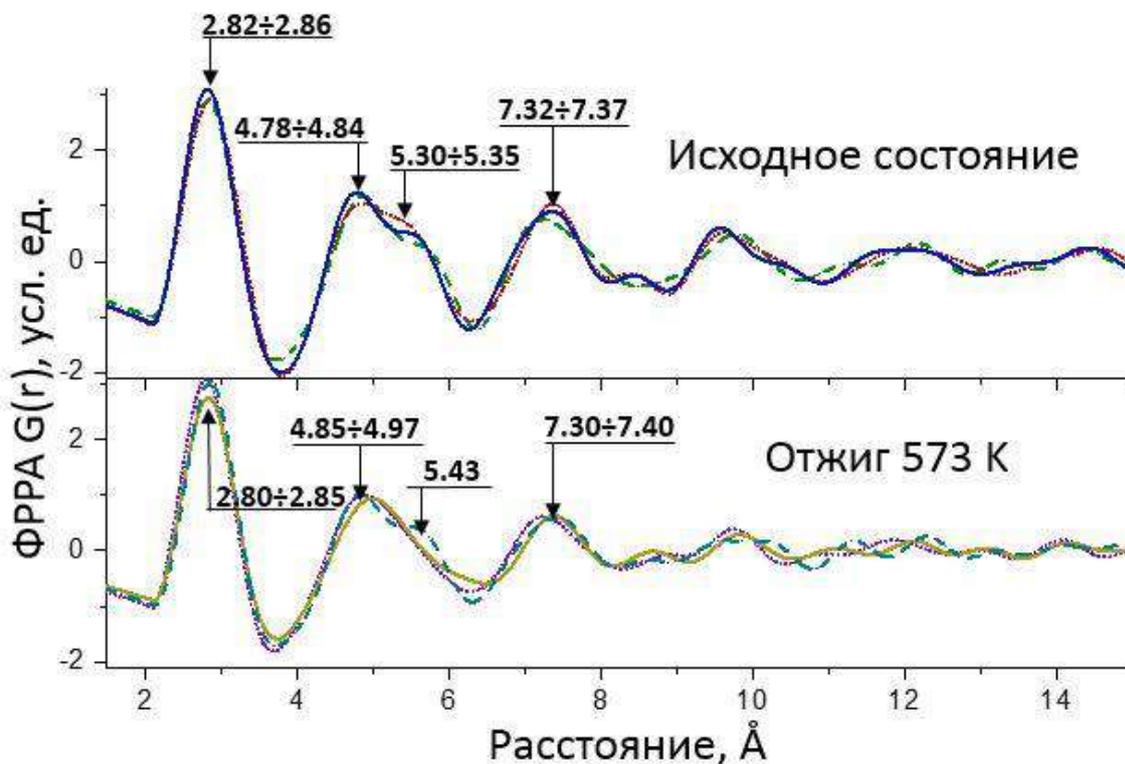


Рис. 1. ФРРА $G(r)$ до и после низкотемпературного отжига в Ti-Ni-Ta поверхностном сплаве. Максимумы на $G(r)$, соответствующие первым трем координационным сферам, отмечены стрелками.

Авторы выражают благодарность научным сотрудникам ИСЭ СО РАН А. Б. Маркову, Г. Е. Озуру, Е. В. Яковлеву за организацию и проведение поверхностных обработок исследованных материалов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы (проект III.23.2.1). Электронно-пучковая обработка поверхности образцов и многокомпонентное легирование поверхностного слоя TiNi сплава выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 18-19-00198 (от 26.04.2018 г.).

1. Microstructural characterization of Ti-Ta-based surface alloy fabricated on TiNi SMA by additive pulsed electron-beam melting of film/substrate system / L. L. Meisner [et al.] // *J. Alloys Comp.* 2018. Vol. 730. P. 376–385.
2. SUEPDF: a program to obtain quantitative pair distribution functions from electron diffraction data / D. T. Tran, G. Svensson, C.-W. Tai // *J. Appl. Crystal.* 2017. Vol. 50. P. 304–312.

DOI: 10.17223/9785946218412/282

ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ НАПРЯЖЕНИЯ В ПЕРЕХОДНОЙ ЗОНЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА С ПОКРЫТИЕМ ИЗ КРЕМНИЯ ИЛИ ТАНТАЛА

^{1,2}Князева А.Г., ¹Маслов А.Л., ¹Крюкова О.Н.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Томский политехнический университет, Томск*

Не секрет, что процессы обработки поверхностей металлов и сплавов потоками частиц и/или внешними источниками энергии сопровождаются не только изменением фазового и химического состава поверхностного слоя, но и формированием полей напряжений и деформаций, которые, в свою очередь, оказывают влияние на динамику фазообразования. В случае обработки потоком электронов материала с покрытием (в данном случае никелида титана с пленками тантала, кремния и др.) поля напряжений и деформаций могут иметь разную физическую природу; они могут быть связаны как с изменением состава вследствие диффузии и химических реакций, так и вследствие различия теплофизических и механических свойств материалов. Первые локализуются в окрестности границ раздела фаз, вторые распространяют влияние на весь макроскопический образец. Напряжения и деформации, связанные со структурными особенностями и наличием дефектов, также имеют место. Учесть все разнообразие причин, приводящих к напряжениям и деформациям, можно лишь на основе многоуровневых моделей, где масштабные уровни связаны друг с другом с помощью обоснованных способов осреднения. Однако на основе подхода, изложенного в [1,2], описание напряженно-деформированного состояния в условиях обработки возможно с помощью введения новых полевых переменных и учета разнообразных перекрестных явлений.

Например, образец с тонким покрытием представляет собой тонкий диск, который нагревается внешним источником с поверхности. Боковая поверхность такого двухслойного диска свободна от внешней нагрузки. Поскольку тепло-диффузионные процессы характеризуются временами, на несколько порядков большими, чем волновые механические явления, то задачи об оценке напряжений и деформаций, сопутствующих поверхностной обработке, можно рассматривать в квазистатическом приближении. Это позволяет существенно упростить решение соответствующих связанных задач.

Так, в случае покрытия из кремния, содержащего малое количество кислорода, в процессе диффузионного перераспределения элементов Ti, Si, Ni, O могут появиться соединения TiO₂, TiNiSi, NiO, SiO₂. Последние будут причиной химических напряжений. В случае покрытия из тантала с примесью кислорода к химическим напряжениям проводят TaNi₃, TaNi₂, TiO₂, Ta₂O₅, NiO. Кроме напряжений, чьи приращения линейно связаны с приращениями деформаций, температуры и концентраций, в поверхностном слое имеются напряжения, связанные со скоростями течения материала, что оказывается принципиальным с приближением к температуре плавления. Если достижение температуры плавления нежелательно, то решение задачи о механическом равновесии образца в условиях поверхностной обработки осуществляется аналитически (решение получается в квадратурах), последующее его использование позволяет указать, какие пути влияния напряжений и деформаций на изменение состава имеют место в условиях обработки. Полученные в результате преобразований нелинейные модели содержат изменившиеся «эффективные свойства» и «кажущиеся» скорости химических реакций. Дальнейшие упрощения оказываются невозможными, и задачи решаются численно.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований РАН на 2017–2020 годы, проект No. 23.2.1

1. Князева А.Г. О моделировании необратимых процессов в материалах с большим числом внутренних поверхностей // Физическая мезомеханика. 2003. Т.6. № 5. С.11-27.
2. Anna Knyazeva, Olga Kryukova, Svetlana Sorokova, Sergey Shanin Coupling Models of New Material Synthesis in Modern Technologies. – in Handbook of Mechanics of Materials. Springer. pp 1-42 https://link.springer.com/referenceworkentry/10.1007/978-981-10-6855-3_39-1

DOI: 10.17223/9785946218412/283

**НЕОДНОРОДНОСТЬ ДЕФОРМАЦИИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА
Ti - 50,9 ат. % Ni ПРИ МЕХАНИЧЕСКОМ ЦИКЛИРОВАНИИ**

¹Полетика Т.М., ¹Гирсова С.Л., ¹Гирсова Н.В., ²Биттер С.М.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

Основными требованиями к наноструктурным (НК) сплавам TiNi, используемым в медицине, являются стабильность механических свойств и долговечность при циклическом нагружении. Особый интерес вызывают структурно-неоднородные НК материалы, которые позволяют достичь сочетания циклической стабильности и высокого сопротивления усталости. К таким материалам можно отнести НК сплавы TiNi с неоднородной зеренно/субзеренной структурой, получаемой после деформации прокаткой и последеформационных отжигов. В работе представлены результаты исследования структуры и деформационного поведения НК сплава TiNi для изготовления тонкостенных трубок медицинского назначения.

Для исследований использовали образцы трубок из стареющего НК сплава Ti - 50,9 ат. % Ni с внешним диаметром 2.2 мм и толщиной стенок 0,3 мм. Выбран низкотемпературный отжиг при 300°C, 1 час, позволяющий избежать нежелательного роста зерен. После отжига критические температуры наблюдаемых мартенситных превращений (МП) B2↔R↔B19' составили: T_R = 22°C, M_S = -50°C, M_F = -134, A_S = -37°C, A_F = -14°C. Структуру исследовали методом просвечивающей электронной микроскопии на микроскопе JEM 2100 (JEOL). Диаграммы нагружения-разгрузки при одноосном растяжении образцов трубок получали при комнатной температуре со скоростью 4×10⁻⁵с⁻¹ на испытательной машине LFM-125.

Показано, что после отжига при 300°C сплав имеет смешанную структуру, включающую бездислокационные нанозерна и области субмикронных и микронных размеров, состоящие из слабаразориентированных субзерен размерами 30-100 нм, занятых сетчатой дислокационной структурой. Средний размер зерен/субзерен составляет 80 нм. Установлено, что низкотемпературное старение развивается неоднородно по объему исследуемого материала. Так, в субзеренной структуре происходит образование высокодисперсных когерентных частиц Ti₃Ni₄ размером 3-5 нм. В нанозернах эффект старения не обнаружен. Частицы Ti₃Ni₄ расположены на дислокациях, способствуют их блокировке при деформации и эффективному упрочнению B2-аустенита. Сплав после отжига находится в B2+R фазах и демонстрирует сверхэластичное поведение, уровень критических напряжений составляет 380 МПа.

Различие структурно-фазового состояния элементов структуры (нанозерен и групп субзерен) и неоднородность их распределения обуславливают неодновременный характер активизации B2↔R, R↔B19', и B2↔R↔B19' МП в объеме при нагружении образцов. Выделены 2 основных фактора, контролирующие процессы МП в НК сплаве TiNi: (i) рост уровня критических напряжений МП с уменьшением размера зерен; (ii) наличие частиц Ti₃Ni₄, обеспечивающих градиенты упругих напряжений и химического состава, что способствует развитию B2↔R превращения. Показано, что после 1 цикла нагружения-разгрузки R-фаза локализуется в отдельных субзернах и зернах субмикронного размера. После 5 циклов нанозерна вовлекаются в процесс МП B2↔B19' и B2↔R, пластины R-мартенсита охватывают объем областей субзерен. После 10 циклов наблюдается преимущественно переориентация R-мартенсита. К концу 10 цикла происходит незначительное сужение циклической петли и формируется устойчивый механический гистерезис. Предполагается, что сочетание высокого предела дислокационной текучести в нанозернах и дисперсного упрочнения субзерен с низким напряжением начала МП в субзеренной структуре способствует одновременному вовлечению в деформацию нано- и микроструктурных уровней, что обеспечивает циклическую стабильность механических характеристик и высокое сопротивление усталости НК сплава Ti - 50,9 ат. % Ni.

DOI: 10.17223/9785946218412/284

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ИСХОДНОГО ПОРОШКА СВМПЭ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИТОВ, АРМИРОВАННЫХ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫМ СТЕКЛОВОЛОКНОМ

^{1,2}Панин С.В., ²Хуан Цитао, ¹Корниенко Л.А., ^{1,2}Буслович Д.Г., ^{1,2}Алексенко В.О.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

Сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) обладает рядом уникальных свойств (износостойкость, низкий коэффициент трения, биоинертность), определяющих его приоритетные области промышленного и медицинского применения. Сверхвысокомолекулярный полиэтилен, обладая достаточно высокими характеристиками прочности, а также низким коэффициентом трения, высокой износо- и химической стойкостью в агрессивных средах, находит применение в узлах трения машин и механизмов, а также в медицине для изготовления компонентов ортопедических имплантатов.

Известно, что стекловолокно широко используется в качестве наполнителя для полимерных композиционных материалов, прежде всего для повышения их механических свойств. Однако неполярная природа СВМПЭ обуславливает низкую межфазную адгезию, поэтому обработка стекловолокон с помощью силансодержащих модификаторов позволяет улучшить сцепление между компонентами, обуславливая одновременно повышение механических и триботехнических свойств СВМПЭ -композиов. В настоящей работе поставлена задача изучить влияние исходного размера порошка СВМПЭ на структуру и трибомеханические характеристики композиов со стекловолокном, функционализированным силансодержащим модификатором. Провести сравнительный анализ механических и триботехнических характеристик композиов на основе двух исходных порошков (GUR-2122 и GUR-4120) в различных условиях трибоиспытаний.

В работе использовали порошки СВМПЭ фирмы Ticona (GUR-2122) с молекулярной массой 4,5 млн и размером отдельных частиц 5 мкм (слабо агломерированных в крупные фрагменты размером до 120-150 мкм), (GUR-4120) с молекулярной массой 4,5 млн и размером порошинок 180 мкм, рубленые стекловолокна (PCB) длиной 2 мм (поставщик ООО «Графит Про», Москва); силансодержащий модификатор KH550 (ООО Дунгуань, Китай), представляющий собой 3-аминопропилтриэтоксисилан (химическая формула $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$).

Объемные образцы композиов получали горячим прессованием с помощью пресса МС-500 в пресс-форме, обогреваемой кольцевой разъемной печью с цифровым управлением (ООО «ИТМ», Томск). Давление при компрессионном спекании составляло 10 МПа; температура – 200 °С; скорость последующего охлаждения - 3-4 °С/мин. Износостойкость образцов в режиме сухого трения определяли по схеме «шар-по-диск» при нагрузке на образец $P=5$ Н и скорости скольжения $V=0.3$ м/с на трибометре CSEM CH-2000 (SCEM, согласно ASTM G99/DIN 50324). Структурные исследования проводили на растровом электронном микроскопе LEO EVO 50 при ускоряющем напряжении 20 кВ по поверхностям скола, полученным механическим разрушением образцов с надрезом, предварительно выдержанных в жидком азоте.

Показано, что исходный размер порошка в условиях равной молекулярной массы определяет характер распределения стекловолокон в матрице, и, как следствие, механические и триботехнические свойства композиов. Установлено, что стеклонаполненный композит на основе мелкодисперсного порошка GUR-2122 обладает более высокими трибомеханическими характеристиками по сравнению с крупнодисперсным GUR-4120. На основании полученных результатов для антифрикционных приложений в трибоузлах рекомендуется применять композит на основе мелкодисперсного порошка «СВМПЭ + 10 вес. % PCB», в котором волокнистый наполнитель функционализирован аппретом KH550.

DOI: 10.17223/9785946218412/285

МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДОСМАЗОЧНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИИМИДА

^{1,2}Панин С.В., ²Ло Цзянкунь, ¹Корниенко Л.А., ^{1,2}Буслович Д.Г., ^{1,2}Алексенко В.О.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

Полиимид (PI) – высокотехнологичный, высокотемпературный полимерный материал, который благодаря своим ценным свойствам применяется в машиностроении, автомобильной, горнодобывающей, химической отраслях, а также в медицине (например, для изготовления эндопротезов, межпозвонковых дисков и т. д). PI обладает по сравнению с другими полимерами высокими характеристиками твердости, жесткости, износостойкости и прочности, показывает повышенную стабильность размеров и ударопрочность даже при длительных высокотемпературных нагрузках. Он предназначен для работы в условиях повышенного давления, химически агрессивных сред и имеет достойную стойкость к гидролизу, а также хорошие электроизоляционные свойства. Быстрое развитие современной науки и техники диктует высокие требования к материалам, в частности, к износостойкости антифрикционных материалов в различных условиях эксплуатации [1]. В настоящей работе поставлена задача поиска наполнителей Iкz полиимида с целью снижения коэффициента трения и повышения износостойкости композитов при сохранении высоких физико-механических показателей не наполненного полимерного материала. Снижение износа полимера за счет введения твердосмазочного наполнителя – один из путей расширения номенклатуры антифрикционных материалов для трибоузлов в машиностроении и медицине.

В работе использовали порошок PI (Solver PI-Powder 1600) со средним размером частиц 16 мкм. В качестве наполнителей использовали частицы политетрафторэтилена (PTFE) (\varnothing 6-20 мкм) и дисульфида молибдена MoS₂ (\varnothing 1÷7 мкм). Образцы для испытаний получали методом горячего прессования при давлении 15 МПа и температуре 370 °С. Механические характеристики определяли при разрывных испытаниях на электромеханической испытательной машине Instron 5582 при растяжении образцов в форме двойной лопатки (ГОСТ 11262-80). Испытание образцов на изнашивание в режиме сухого трения проводили по схеме «шар-по-диску» при нагрузке $P=5$ Н и скорости скольжения $V=0,3$ м/с на трибометре CSEM СН-2000 в соответствии с ASTM G99. При трибоиспытаниях использованы два типа шарика-контртела: из стали ШХ15 и керамический из Al₂O₃. Диаметр шарика контртела составлял 6 мм. Дистанция испытаний равна 1 км, радиус траектории триботрека – 16 мм. Структурные исследования проводили на растровом электронном микроскопе LEO EVO 50 при ускоряющем напряжении 20 кВ по поверхностям скола, полученным механическим разрушением образцов с надрезом, предварительно выдержанных в жидком азоте.

Показано, что эффективным твердосмазочным наполнителем для полиимида является политетрафторэтилен, повышающий износостойкость матрицы до 100 раз, прежде всего за счет формирования пленки переноса на контртеле. Дисульфид молибдена, несмотря на свой твердосмазочный статус, выступает «легкого» абразива и при содержании 5 вес. % не обеспечивает сохранение механических характеристик на уровне исходного полимера.

Двухкомпонентный композит «PI + 15 вес. PTFE» рекомендован в качестве антифрикционного для узлов трения в металло- и керамо-полимерных трибосопряжениях.

1. Geraldine T, Thomas G. Tribological characteristics of polyimide composites in hydrogen environment. Tribology International 2015; 92: 162–171.

DOI: 10.17223/9785946218412/286

ФОРМИРОВАНИЕ КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ МИКРОДУГОВЫХ ПОКРЫТИЙ С ИМПРЕГНИРОВАННЫМИ ЦИНКСОДЕРЖАЩИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

¹Чебодаева В.В., ¹Седельникова М.Б., ²Бажанова В.С., ^{1,3}Шаркеев Ю.П.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

³*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

В настоящее время существует высокая необходимость разработки новых биоматериалов для создания дентальных и ортопедических имплантатов, применяемых в контакте со средой живого организма. Имплантаты для фиксации поврежденных костей изготавливают из материалов, которые могут обеспечить фиксацию в течение 12–18 месяцев. Поэтому материалы, применяемые для изготовления таких имплантатов, должны выдерживать значительные нагрузки. Наилучшим решением на сегодняшний день является применение таких металлов как титан и его сплавы. По данным US Industry Study [1] титан и сплавы на его основе являются наиболее перспективными для создания имплантатов, в силу биосовместимости, коррозионной стойкости и основных показателей механических свойств.

Чтобы усилить взаимодействие между имплантатом и костной тканью и повысить остеоинтеграцию, многие исследователи модифицируют поверхность титана кальцийфосфатными (КФ) покрытиями. Такие покрытия являются привлекательным материалом для регенерации, по составу близким к минеральному составу костей. Перспективным методом для нанесения данных биопокровов на металлические имплантаты является метод микродугового оксидирования (МДО), позволяющий создавать покрытия с пористой структурой и развитой морфологией поверхности, а также вводить в покрытие модифицирующие добавки. Однако ввиду высокой пористости, которая благоприятно сказывается как на адгезии клеток, так и адгезии бактерий, часто имплантаты с такими покрытиями могут инфицироваться. По данным Stevens Institute of Technology (Hoboken, NJ) при применении имплантатов среди постоперационных осложнений инфекции составляют более 15%. Введение в пористое покрытие таких наночастиц как ZnO, TaCu, FeCu или TaZn позволит придать антибактериальный эффект имплантату с помощью локального высвобождения антибактериальных агентов и усилить механические характеристики биопокровов. Известно, что цинк является важным микроэлементом в костной ткани человека. Он играет значительную роль в биологических функциях, таких как синтез ДНК, активность ферментов, обмен веществ нуклеиновых кислот, биоминерализация, гормональная активность, наряду с этим обладает высокими антибактериальными свойствами.

Целью работы было формирование кальцийфосфатных покрытий с наночастицами оксида цинка и исследование свойств данных покрытий.

В работе в качестве подложек использовали пластины размерами $10 \times 10 \times 1$ мм³ из «чистого» титана марки VT1-0. КФ покрытие формировали методом МДО на установке «MicroArc-3.0» в электролите на основе водного раствора ортофосфорной кислоты, карбоната кальция и гидроксиапатита. Морфологию поверхности КФ покрытий исследовали методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе «LEO EVO-50» (ЦКП Нанотех, Томск). Исследование смачиваемости проводили на установке «Easy Drop DSA1» Kruss (НИ ТПУ, г. Томск). Для расчета свободной поверхностной энергии покрытий был выбран метод Оуэнса-Вендта. Наночастицы ZnO осаждали на сформированные КФ покрытия с помощью их пропитки в суспензии с дистиллированной водой и нанопорошком ZnO с одновременным ультразвуковым (УЗ) воздействием. Длительность предварительной УЗ обработки суспензии с нанопорошком ZnO перед введением наночастиц в покрытие варьировали от 10 до 60 мин.

Исследование морфологии поверхности КФ покрытий методом РЭМ показало, что морфология КФ покрытия при режиме осаждения наночастиц оксида цинка после УЗ обработки длительностью 10 мин представлена целыми и частично разрушенными сфероидальными образованиями и неравномерно распределенными агломератами с

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

наночастицами оксида цинка (рис. 1а). Постепенное увеличение длительности УЗ обработки порошка длительностью 60 мин (рис. 1б) приводит к уменьшению областей с наночастицами оксида цинка и более равномерному распределению наночастиц оксида цинка в виде «налета» на поверхности сфер и внутри пор покрытия. Шероховатость покрытий после модифицирования наночастицами оксида цинка увеличилась от $R_a=2,5$ мкм до $R_a=3,1$ мкм. Также, установлено, что с ростом длительности УЗ обработки суспензии с порошком от 10 до 60 минут приводит к уменьшению содержания цинка в покрытии от 2.8 ат.% до 1.5 ат.%. Кроме того, в покрытии присутствовали следующие элементы: Ca (3.2-3.6 ат.%), P (14,9-15.0 ат.%), O (68,2-68.6 ат.%) и Ti (9.9-11,1 ат.%).

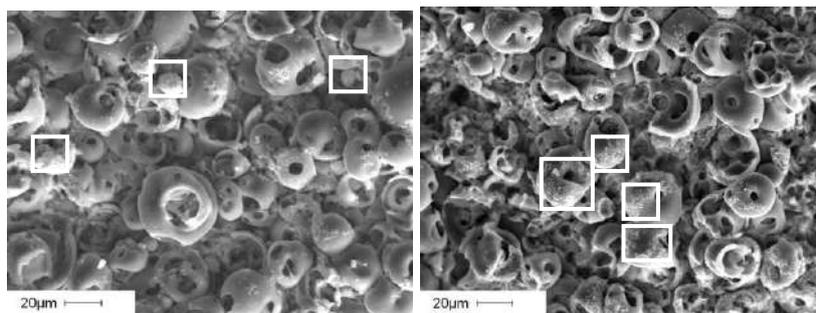


Рис. 1. а – РЭМ-изображения КФ покрытий с наночастицами оксида цинка (белыми линиями выделены агломераты с наночастицами оксида цинка).

Исследование смачиваемости показало, что после модификации наночастицами ZnO величина краевых углов увеличивается 20 от 68 градусов с водой и от 31 до 96 градусов с глицерином. При этом поверхностная энергия данных покрытий уменьшается от 73 мДж/м² до 70 мДж/м² с преобладающей дисперсионной компонентой. Варьирование длительности предварительной УЗ обработки суспензии с ZnO не приводит значительным изменениям краевых углов и поверхностной энергии.

Таким образом, методом МДО на титановых образцах были получены КФ пористые покрытия с импрегнированными наночастицами оксида цинка. Исследования смачиваемости показало, что введение наночастиц оксида цинка способствует увеличению краевых углов и дисперсионной компоненты поверхностной энергии покрытий. Это свидетельствует о влиянии шероховатости и морфологии на гидрофильные свойства покрытий.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23. В заключение авторы выражают благодарность заведующему лабораторией физики высокодисперсных материалов ИФПМ СО РАН Лернеру М.И. за предоставление нанопорошка ZnO и обсуждение результатов исследований.

DOI: 10.17223/9785946218412/287

**GRAIN CHARACTERISTICS AND MECHANICAL PROPERTIES
OF BIOINERT Ti-40 WT. %Nb ALLOY**

¹Zhu Qifang, ^{2,3}Sharkeev Yu.P., ²Eroshenko A.Yu., ¹Sun Zeming, ¹Zhang Hongju,
¹Han Xiaole, ²Glukhov I.A., ^{2,4}Mairambekova A.M.

¹*General Research Institute for Non-ferrous Metals, Beijing, China*

²*Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia*

³*National Research Tomsk Polytechnic University Tomsk, Russia*

⁴*National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia*

eroshenko@ispms.tsc.ru

Advanced developments in up-dated implants impose new requirements not only in furthering rest-hardening, but also in designing new materials with low elastic modulus level. The most preferable ones are valve metals of titanium, zirconium and niobium and their alloys. This, in its turn, allows the distributions of deformation and strain on bone-implant interfaces and excludes possible breakdown at rigid fixation of the implant to the bone. Elastic modulus for most titanium alloys ranges from 100 to 120 GPa and is more than that of bones (15–50 GPa) [1]. Accordingly, a perspective trend in medical materials technology is the development of biocompatible titanium alloys with low elastic modulus, for example, Ti–Nb alloy systems. Titanium alloyed by niobium 40-45 wt. % could decrease the elastic modulus up to 60 GPa.

Severe plastic deformation (SPD) methods promote the production of ultrafine-grained billets with significantly high mechanical properties in comparison to their coarse-grained analogues [2]. Usually, ultrafine-grained state in metals and alloys is attained by combining two or more different SPD methods.

This paper focuses on the development of microstructure grain characteristics and mechanical properties (microhardness) of bioinert ultrafine-grained Ti-40 wt. % Nb alloy. The ultrafine-grained structure with average structure elements size of 0.3 μm alloy was produced by two-stage severe plastic deformation (SPD). SPD method included the multiple abc-pressing and multi-pass rolling in grooved rolls at room temperature and further pre-recrystallization low-temperature annealing. In ultrafine-grained state Ti-40 wt. % Nb alloy had a structure represented by β -phase grains with ellipsoidal particles of ω -phase, localized in the bulk of β -grains, and α -phase subgrains.

It was shown that a relatively large amount of micron grains and subgrains in the alloy structure were produced by SPD method. Grain misorientation angle of the sample, the grain distribution, phase distribution were studied by electron backscatter diffraction EBSD-method. Many local deformation bands and sub-grain formation were caused during SPD. Local shear zone, twins and low-angle grain boundaries were created in meantime. The misorientation angles less than 6.45 ° account for 53.8% of the alloy. It plays a strong role for improving the material strength. Microhardness of the alloy increased from 1730 MPa up to 3000 MPa. Ultrafine-grained Ti-40 wt. % Nb alloy is β -phase alloys. In the alloy the proportion of α -phase (3.3%) much proportion of β -phase (96.7%). The misorientation angles less than 6.45 ° account for 53.8% of the alloy. It is clear that slip of dislocation is the base mechanism of deformation in the alloy. Measured elastic modulus of ultrafine-grained alloy is to less than 60 GPa.

Thus, the ultrafine-grained Ti-40 wt. % Nb alloy has low elastic modulus and good mechanical properties, compared with ones of biomedical medium-strength titanium alloys.

1.Niinomi M., Liu Y, Nakai M., Liu H., Li H. Biomedical titanium alloys with Young's moduli close to that of cortical bone. *Regenerative Biomaterials*. 2016, 3(1). P. 173–185.

2. Valiev R Z, Zhilyaev A P, Langdon T G. *Bulk Nanostructured Materials: Fundamentals and Applications*, USA, New Jersey: John Wiley, Hoboken and TMS, 2014. p. 456.

The research was performed by Fundamental Scientific Research Program of National Academy of Sciences 2017-2020; Program 23.2.

DOI: 10.17223/9785946218412/288

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ НАПРЯЖЕНИЯ МАРТЕНСИТНОГО СДВИГА И ПРЕДЕЛА ТЕКУЧЕСТИ В КРУПНОЗЕРНИСТЫХ ОБРАЗЦАХ СПЛАВА $Ti_{49.3}Ni_{50.7}$ (АТ.%)

¹Жапова Д.Ю., ¹Лотков А.И., ¹Гришков В.Н., ²Гусаренко А.А., ¹Тимкин В.Н.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

В данной работе представлены результаты исследования закономерностей изменения предела текучести, напряжения мартенситного сдвига и максимального значения обратимой неупругой деформации в зависимости от температуры изотермических циклов «нагрузка-разгрузка». В работе были исследованы крупнозернистые образцы сплава $Ti_{49.3}Ni_{50.7}$ (ат.%). При охлаждении и нагреве образцы исследованных сплавов испытывали мартенситное превращение (МП) $B2 \leftrightarrow B19'$ (где $B2$ – высокотемпературная фаза, а $B19'$ – моноклинная мартенситная фаза). Температуры начала и конца МП в фазу $B19'$ составляли $M_H=252K$ и $M_K=223K$, а температуры начала и конца обратного МП в $B2$ фазу – $A_H=258K$ и $A_K=273K$.

Исследования проводили при кручении образцов на установке типа обратного крутильного маятника. Заданная в процессе изотермического нагружения деформация (γ_t), включает неупругую ($\gamma_{снд}$) и пластическую ($\gamma_{тр}$) деформацию, развивающуюся по дислокационным механизмам. Неупругая деформация ($\gamma_{снд}$) является суммой величин эффектов сверхэластичности ($\gamma_{св.}$) и памяти формы ($\gamma_{эф}$): $\gamma_{снд}=\gamma_{св.}+\gamma_{эф}$. Величину сверхэластичности определяли как величину возврата неупругой деформации (в том числе малой деформации Гука) в изотермических циклах «нагрузка-разгрузка» при деформировании образцов кручением. Величина эффекта памяти формы равна возврату неупругой деформации при последующем нагреве разгруженных образцов до температуры 480К. Накопленная при данной γ_t пластическая деформация ($\gamma_{тр}$) соответствует остаточной деформации при 480К. В каждом последующем цикле γ_t увеличивалась (вплоть до разрушения образцов). Напряжение мартенситного сдвига (τ_m) определяли по зависимостям «напряжение-деформация». Предел текучести ($\tau_{0.3}$) определяли согласно [1]: в качестве этой величины брали напряжение, соответствующее накоплению пластической деформации 0.3%.

Видно, что значение предела текучести во всем исследованном диапазоне температур изменяется с минимумом, наблюдаемом вблизи $M_H=252K$, таблица 1. При этом наиболее высокие значения $\tau_{0.3}$ наблюдаются в мартенситном состоянии при $T_{деф}=164K$, что коррелирует с результатами [2]. Вблизи M_H происходит размягчение образцов, таблица 1. При повышении температуры образцы исследуемого сплава упрочняются. В свою очередь значение напряжения мартенситного сдвига (в мартенситном состоянии – напряжение, при котором наблюдается переориентация доменов мартенситной фазы $B19'$) также имеет немонотонную зависимость от температуры изотермических циклов «нагрузка-разгрузка», таблица 1. В мартенситном состоянии величина τ_m составляла 165-180 МПа, а вблизи M_H величина мартенситного сдвига уменьшается до 55-70 МПа. При температуре $T_{деф}=281K$, когда образцы находятся в предпереходном состоянии $B2$ фазы (на 29 градусов выше M_H и на 8 градусов выше A_K), напряжение мартенситного сдвига составляет 180 МПа. В состоянии $B2$ -фазы при $T_{деф}=315K$ (на 42 градуса выше A_K) τ_m достигает 395 МПа, что приближается к величине $\tau_{0.3}=455$ МПа при этой температуре.

Отметим, что наиболее высокие значения суммарной обратимой деформации (сумма вкладов эффекта памяти формы и сверхэластичности) наблюдаются при температурах деформирования вблизи M_H и ниже, когда разница $|\tau_{0.3}-\tau_m|$ превышает 270 МПа. При $T_{деф}=281K$ внешние напряжения инициируют МП в $B19'$ -фазу, и вследствие этого $\gamma_{снд}$ равна 17.9%. При $T_{деф}=315K$, когда разница $|\tau_{0.3}-\tau_m|$ минимальна и составляет 55 МПа, при кручении в образцах одновременно происходят пластическая деформация и развитие МП. Это приводит к снижению величины суммарной неупругой деформации до 15.9%.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Из таблицы 1 видно, что наиболее высокие значения обратимой неупругой деформации наблюдаются в наиболее упрочненных материалах, в которых предел текучести значительно бы превышал напряжение мартенситного сдвига τ_m . Эти результаты коррелируют с данными других авторов [3, 4]. В [3, 4] упрочненное состояние было обусловлено измельчением зёрно-субзёрненной структуры.

Таблица 1. Температуры деформирования, максимальные значения суммарной неупругой деформации, величины напряжения мартенситного сдвига и предел текучести.

Фазовый состав	$T_{\text{деф}}$, К	$\tau_{0.3}$, МПа	τ_m , МПа	$\gamma_{\text{снд}}(\text{max})$, %
B19'	164	490	180	18.4
	204	435	165	19.2
B2+ B19'	242	415	70	19.3
Предпереходное состояние B2	260	445	55	19.1
	281	455	160	17.9
B2	299	450	396	15.8
	315	450	370	15.9

Примечание: $T_{\text{деф}}$ – температура деформирования изотермических циклов «напряжение-разгрузка»; $\gamma_{\text{снд}}(\text{max})$ – максимальная величина суммарной неупругой деформации; τ_m – напряжение мартенситного сдвига; $\tau_{0.3}$ – предел текучести.

Работа поддержана Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Lotkov A., Grishkov V., Timkin V., Baturin A., Zhapova D. Yield stress in titanium nickelide-based alloys with thermoelastic martensitic transformations // *Materials Science and Engineering A*. 2019. V.744. P.74-78.
2. Пушин В.Г., Кондратьев В.В., Хачин В.Н. Предпереходные явления и мартенситные превращения. – Екатеринбург: УрО РАН, 1998. – 368 с.
3. Полякова К.А., Рыклина Е.П., Прокошкин С.Д., Дубинский С.М. Зависимость функциональных характеристик термомеханически обработанного никелида титана от размера структурных элементов аустенита // *Физика металлов и металловедение*. 2016. Т.117. С. 845–855.
4. Прокошкин С.Д., Браиловский В., Хмелевская И.Ю., Добаткин С.В., Инаекян К.Э., Демерс В., Бастарш Е., Татьянин Е.В. Формирование нанокристаллической структуры при интенсивной пластической деформации прокаткой и отжиге и повышение комплекса функциональных свойств сплавов Ti-Ni // *Известия РАН. Серия физическая*. – 2006. – Т.70. – №9. – С.1344-1348.

DOI: 10.17223/9785946218412/289

САМОЗАЛЕЧИВАНИЕ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ КЕРАМИКАХ ZrB₂-SiC

¹Бурлаченко А.Г., ^{1,2}Мировой Ю.А., ^{1,2}Дедова Е.С., ^{1,2}Буякова С.П.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

Использование высокотемпературных керамик в качестве материала тепловой защиты фюзеляжа и острых кромок крыла даёт возможность увеличения скорости перемещения гиперзвукового аэрокосмического транспортного средства [1-5]. Наиболее часто в качестве материала тепловой защиты гиперзвуковых аппаратов рассматривают керамические композиционные материалы системы ZrB₂-SiC [6-7]. Эти материалы характеризуются высокой термической стойкостью, малым удельным весом и высокой прочностью. Однако, как и все непластичные материалы, керамики ZrB₂-SiC весьма чувствительны к присутствию в их структуре дефектов и трещин, которые могут существенно уменьшить их надёжность [8]. Однако эти материалы способны проявлять самозалечивание дефектов при воздействии высоких температур. Получение данных о кинетике самозалечивания высокотемпературных керамик позволит увеличить их надёжность посредством создания структурно-фазовых предпосылок к самозалечиванию дефектов.

Цель исследований – изучение кинетики залечивания дефектов в керамических композитах с различным соотношением компонентов ZrB₂-SiC.

Исследования проводились на керамиках ZrB₂-SiC с содержанием SiC 0, 5, 10, 15, 20 и 25 %. Керамические образцы имели форму дисков $\varnothing \approx 15$ мм, $h \approx 4$ мм, получены спеканием под давлением 35 МПа с изотермической выдержкой в течение 15 минут при температуре 1800 °С. Дефекты в виде пропила формировались с помощью алмазного инструмента. Глубина пропилов во всех исследуемых образцах составляла 100 ± 5 мкм, ширина раскрытия на поверхности 60 ± 20 мкм.

Кинетика самозалечивания сформированных дефектов в образцах ZrB₂-SiC изучалась после их нагрева до температур 1200, 1400 и 1600 °С с изотермической выдержкой 0, 5 и 10 минут в воздушной среде. Скорость нагрева составляла 15 мин., скорость охлаждения 15 мин. Измерялась остаточная глубина дефектов L и рассчитывался процент самозалечивания как:

$$H = \frac{L_0 - L_n}{L_0} \times 100\%,$$

где L_0 – глубина дефекта в исходном состоянии, L_n – глубина дефекта после термообработки.

Обнаружено, что эффективное самозалечивание дефектов произошло при нагреве керамики до температуры 1600 °С, рисунок 1. Среднее значение H для составов с содержанием SiC 10 - 20% близко к 100%, для образцов с содержанием карбида кремния 0; 5; 25 %, заполнение дефектов составило 70-80%. Нагрев керамики ZrB₂-SiC до температуры 1400 °С обеспечил самозалечивание дефектов в среднем на 20-40 %. Ещё меньшее

Самозалечивание дефектов керамики ZrB₂ при нагреве до температур 1200 ° и 1400 °С и изотермической выдержке в течение 5 минут превышало самозалечивание образцов ZrB₂-SiC. Однако увеличение продолжительности термообработки привело к частичному или полному разрушению образцов ZrB₂. Заполнение дефектов произошло при нагреве керамики до температуры 1200 °С.

Для керамических композитов всех составов ZrB₂-SiC увеличение длительности термообработки обеспечивало увеличение H . При этом быстрее дефекты устранялись в керамике с содержанием карбида кремния 15 и 20 %.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

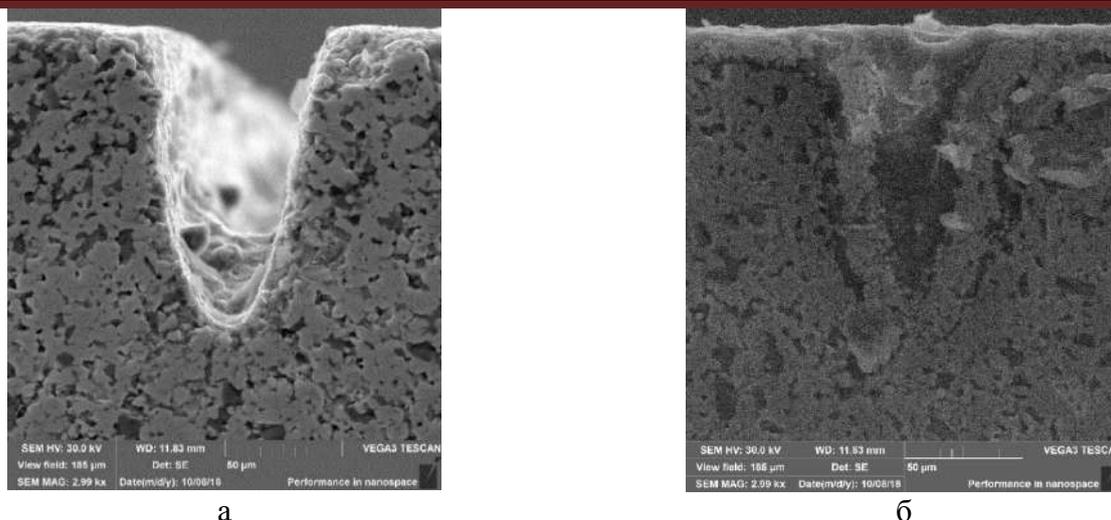


Рис. 2 - Снимки дефектов в образце с содержанием карбида кремния 20 % до а) и после б) нагрева до температуры 1600 °С

Таким образом, воздействие температуры 1600 °С на керамику в условиях отсутствия изотермической выдержки привело к практически полному залечиванию дефектов вне зависимости от содержания SiC, но наибольшие изменения наблюдались для состава, содержащего 20% SiC. Самозалечивание дефектов керамики ZrB₂ при нагреве до температуры 1400 °С и изотермической выдержке в течение 5 минут превышало самозалечивание образцов ZrB₂-SiC. Увеличение длительности термообработки при температурах отжига 1200 ° и 1400 °С обеспечивало увеличение *H*, а наилучшими показателями обладали керамики с содержанием карбида кремния 15 и 20 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований, проекта III.23.2.3.

1. Monteverde F. et al. Plasma wind tunnel testing of ultra-high temperature ZrB₂-SiC composites under hypersonic re-entry conditions //Journal of the European Ceramic Society. – 2010. – Т. 30. – №. 11. – С. 2313-2321.
2. Justin J. F., Jankowiak A. Ultra High Temperature Ceramics: Densification, Properties and Thermal Stability //AerospaceLab. – 2011. – №. 3. – С. p. 1-11.
3. Opeka M. M., Talmy I. G., Zaykoski J. A. Oxidation-based materials selection for 2000 C+ hypersonic aerosurfaces: theoretical considerations and historical experience //Journal of materials science. – 2004. – Т. 39. – №. 19. – С. 5887-5904.
4. Levine S. R. et al. Evaluation of ultra-high temperature ceramics for aero propulsion use //Journal of the European Ceramic Society. – 2002. – Т. 22. – №. 14-15. – С. 2757-2767.
5. Cutler R. A. Engineering properties of borides //Ceramics and glasses, engineered materials handbook. – 1991. – Т. 4. – С. 787-803.
6. Upadhy K., Yang J. M., Hoffman W. P. Advanced materials for ultrahigh temperature structural applications above 2000° C //Am. Ceram. Soc. Bull. – 1997. – Т. 76. – №. 12. – С. 51-56
7. Zhang S. C., Hilmas G. E., Fahrenholtz W. G. Improved oxidation resistance of zirconium diboride by tungsten carbide additions //Journal of the American Ceramic Society. – 2008. – Т. 91. – №. 11. – С. 3530-3535.
8. Guo S. Q. Densification of ZrB₂-based composites and their mechanical and physical properties: a review //Journal of the European Ceramic Society. – 2009. – Т. 29. – №. 6. – С. 995-1011.

DOI: 10.17223/9785946218412/290

МЕДИЦИНСКИЙ ПОЛИУРЕТАН С УЛУЧШЕННОЙ БИОСОВМЕСТИМОСТЬЮ ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ МЕТОДОМ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ

¹Чудинов В.С., ¹Шардаков И.Н., ²Маслова В.В., ²Солодников С.Ю., ²Фефилова И.В.,
³Литвинов В.В., ³Фрейнд Г.Г., ⁴Кондюрин А.В.

¹ИМСС УрО РАН, Пермь, Россия

²Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

³Пермский государственный медицинский университет, Пермь, Россия

⁴Школа физики, Университет Сиднея, Сидней, Австралия

Существенное улучшение качества жизни человека при различных заболеваниях сердечно-сосудистой системы и других органов, а также грыжах, травмах возможно при своевременной имплантации синтетических протезов тканей и органов. Однако при имплантации искусственного протеза возникает реакция организма на инородное тело, что приводит к фиброзу установленного имплантата [1]. Необходимо отметить, что на поверхности всех имплантируемых материалов самопроизвольно и быстро адсорбируются белки пациента. Только после этого происходит взаимодействие поверхности материала с клетками пациента. Таким образом, конформация и типы адсорбированных протеинов будут влиять на дальнейшую реакцию иммунной системы на инородное тело [2, 3]. Следовательно, для уменьшения реакции иммунной системы на инородное тело можно осуществить модификацию поверхности имплантата. В данной работе рассматривается вариант модификации – ионная имплантация из плазмы тлеющего разряда.

Исследовались образцы полиуретанов медицинского назначения СКУ-ПФЛ на основе форполимера из простого олигоэфира и 2,4-толуилендиизоцианата, отверждённого смесью отвердителей МОКА, полифурита и Воранола. Образцы обрабатывались ионами азота высокой энергии 20 кэВ при разных дозах облучения от $5 \cdot 10^{14}$ до 10^{16} ион/см². При воздействии ионного луча на поверхность полимерного материала разрушается верхний слой молекулярной структуры толщиной около 100 нм с последующей рекомбинацией межмолекулярных и межатомных связей, реструктуризацией молекулярной структуры [4]. Формирование новых структур носит сложный стохастический характер. По данным ИК-спектроскопии с приставкой МНПВО наблюдаются изменения в молекулярной структуре образованного слоя в отличие от исходного полимера. По этим данным установлено наличие линий колебаний гидроксильных и нитрильной групп, колебаний двойных связей С=О, С=N и С=C. Спектры комбинационного рассеяния света (КРС) показали две новые линии, относящиеся к колебаниям графита E_{2g} и A_{1g}. Таким образом, ионная обработка поверхности полиуретана позволила сформировать графитоподобный углеродный нанослой.

Атомно-силовая микроскопия показывает изменение механических свойств поверхности полиуретана за счет образования углеродного слоя и морфологические изменения поверхности, такие как появление волн и трещин. Из анализа ЭПР спектров выявлено наличие неспаренных электронов в материале после ионной имплантации. При этом изменилась поверхностная энергия полиуретана от 40 МДж/м² до 46 МДж/м² при дозе облучения $5 \cdot 10^{14}$ ион/см², с увеличением до 53 МДж/м² при максимальном флюенсе $1 \cdot 10^{16}$ ион/см². Таким образом, образованная структура поверхностного слоя полиуретана обладает гидрофильностью и высокой активностью за счет наличия свободных радикалов.

По данным экспериментов по адсорбции протеина бычьего сывороточного альбумина и его десорбции в результате воздействия детергентами (додецилсульфат натрия) при температуре 70 °С была подтверждена гипотеза о ковалентной связи белка с углеродной поверхностью обработанного полиуретана. Оценка активности белка и сохранение конформации на такой поверхности подтверждается одной из работ [5]. Подсчет количества ядер и определение морфологических особенностей цитоплазмы культуры клеток аорты

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

человека, высеянных на обработанных и необработанных полимерах, показывают улучшение клеточной адгезии и пролиферации на углеродном слое обработанного полиуретана.

Для оценки реакции организма были подготовлены 15 образцов полиуретанов, по 3 необработанных и обработанных с дозами облучения $5 \cdot 10^{14}$, 10^{15} , $5 \cdot 10^{15}$, 10^{16} ион/см². Образцы имплантировались в крыс линии SD и изымались из животных по истечении 1 месяца. Производилась оценка клеточной реакции и измерение толщины соединительно-тканной оболочки, ограничивающей имплантаты. По итогам гистологических исследований было установлено, что полиуретан с углеродным слоем, образованным в результате обработки методом ионной имплантации, при взаимодействии с иммунной системой живого организма вызывает сравнительно меньшую реакцию на инородное тело, чем исходный необработанный полиуретан.

1. Siddharth Jhunjhunwala, Stephanie Aresta-DaSilva, Katherine Tang, etc. Neutrophil Responses to Sterile Implant Materials // PLoS One. 2015. 10(9): e0137550. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0137550>
2. Brodbeck WG, Colton E, Anderson JM. Effects of adsorbed heat labile serum proteins and fibrinogen on adhesion and apoptosis of monocytes/macrophages on biomaterials // J Mater Sci Mater Med. 2003. 14(8): 671–5.
3. Hu WJ, Eaton JW, Ugarova TP, Tang L. Molecular basis of biomaterial-mediated foreign body reactions // Blood. 2001. 98(4): 1231–8.
4. V.B. Odzhaev, I.P. Kozlov, V.N. Popok, D.B. Sviridov, Ion Implantation of Polymers / Minsk: Belorussian State University, 1998.
5. Alexey Kondyurin, Neil J. Nosworthy Marcela M. M. Bilek Robert Jones Paul J. Pigram Surface attachment of horseradish peroxidase to nylon modified by plasma-immersion ion implantation // Journal of Applied Polymer Science. Volume120, Issue5, 2011. P. 2891-2903. DOI 10.1002/app

DOI: 10.17223/9785946218412/291

**ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ ПРИ МИКРОДУГОВОМ
ОКСИДИРОВАНИИ НА АДГЕЗИОННУЮ ПРОЧНОСТЬ КАЛЬЦИЙФОСФАТНЫХ
ПОКРЫТИЙ**

^{1,2}Казанцева Е.А., ²Комарова Е.Г.

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН*

Одним из наиболее перспективных направлений в медицинском материаловедении является модификация поверхности металлических имплантатов, для обеспечения нового комплекса эксплуатационных свойств. Микродуговое оксидирование (МДО) представляет собой эффективный метод получения прочно срастывающихся с костной тканью биоактивных кальций-фосфатных (КФ) покрытий на поверхности вентильных металлов. Свойства МДО-покрытий определяются в значительной степени параметрами микроразрядов, которые можно изменить, прикладывая внешнее давление, создаваемое в электролите ультразвуковыми колебаниями (УЗК) [1]. Увеличение интенсивности каскада микроплазменных разрядов под действием УЗК приводит к увеличению пористости в покрытиях, что может послужить причиной снижения адгезионной прочности, которая является важной эксплуатационной характеристикой покрытий, используемых для медицинских целей.

Целью работы было исследование адгезионной прочности КФ покрытий к титановой подложке, сформированных методом МДО в условиях внешнего УЗ.

Нанесение КФ покрытий на образцы из титана марки ВТ1-0 проводили методом МДО на установке MicroArc-3.0 в электролите и при параметрах процесса, описанных ранее в работе [2]. Были выбраны три основных режима нанесения покрытий: режим 1 (контрольный, МДО без внешнего УЗ); режим 2 (МДО с внешним импульсным УЗ, мощностью 35 Вт и частотой УЗК 37 кГц); режим 3 (МДО с внешним непрерывным УЗ, мощностью 100 Вт и частотой 35 кГц). В работе для измерения адгезионной прочности покрытий к металлической основе был выбран метод равномерного отрыва (клеевой метод). Испытания на отрыв проводили на универсальной испытательной машине Walter+Bai AG LFM (ЦКП «Нанотех» ИФПМ СО РАН).

В работе было установлено, что рост толщины покрытий при осаждении методом МДО в режимах 2 и 3 происходит интенсивнее, чем в контрольном режиме. За 10 мин процесса в режимах 2 и 3 формируются покрытия толщиной до 60 ± 2 мкм, в то время покрытия, синтезированные в режиме 1, имеют меньшую толщину до 50 ± 2 мкм. Помимо этого, пропускание УЗК через электролит сопровождается формированием в покрытиях внутренних макропор больших размеров (15-40 мкм). Это приводит к увеличению внутренней пористости покрытий осажденных в режиме 2 до 41% и в режиме 3 до 38%. Тогда как покрытия, нанесенные методом МДО, характеризовались пористостью, не превышающей 25%.

Методом оптической микроскопии показано, что на поверхности титановых образцов после предварительной подготовки отчетливо наблюдались полосы шлифования (рис. 1 а, б), а на поверхности образцов с нанесенным в трех режимах МДО-покрытием присутствовали структурные элементы – сферы. На оптических изображениях всех образцов после отрыва было видно, что на поверхности присутствуют как области с оставшимся не отслоившимся покрытием, так и области «голой» подложки. Это указывает на то, что отрыв покрытий происходил по адгезионно-когезионному механизму. Однако, области «голой» подложки на оптических снимках покрытий после отрыва внешне отличались от подложки после предварительной обработки – на них не наблюдались полосы шлифования, что может быть связано с модифицированием поверхности титана в начальной стадии процесса МДО и формированием на поверхности пограничного оксидного подслоя. Отрыв покрытий, сформированных в режимах 2 и 3, происходил преимущественно по границе с подложкой, поскольку областей с оксидным подслоем на оптических изображениях было значительно больше, чем у покрытий, сформированных в режиме 1. Это может быть связано с увеличением

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

толщины и внутренней пористости, а также формированием локальных макропор в граничащих с подложкой слоях у КФ покрытий, синтезированных в условиях внешнего УЗ. Увеличение толщины и объемной пористости у покрытий, сформированных в условиях внешнего УЗ (режимы 2 и 3), сопровождается ростом остаточных внутренних напряжений, уменьшающих прочность соединения покрытия с подложкой. В результате этого механизм отрыва покрытия менялся – образование трещин происходило по контактными поверхностям структурных элементов, границам макропор и межслойным границам.

Средние значения адгезионной прочности составили: $23,4 \pm 3,3$ МПа – для покрытий, нанесенных в контрольном режиме; $19,3 \pm 3,0$ МПа – для покрытий, нанесенных в режиме 2; $20,1 \pm 1,6$ МПа – для покрытий, нанесенных в режиме 3.

Таким образом, в работе установлено, что наложение ультразвукового поля в процессе синтеза покрытий приводит к уменьшению адгезионной прочности покрытий от 23 до 19 МПа, что обусловлено увеличением толщины (до 60 мкм) и внутренней пористости (до 41%) покрытий и формированием локальных макропор в нижних граничных с подложкой слоях. Все сформированные покрытия имеют адгезионную прочность, достаточную для их эксплуатации в медицинских целях (ГОСТ Р ИСО 13779-4-2013).

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 гг., направление III.23.2.

1. Нечаев Г.Г., Попова С.С. О возможности внешнего воздействия на микрозаряды при микроплазмохимическом электролитическом процессе // Тезисы докладов II Междунар. конференции «Покрытия и обработка поверхности» 15-17 марта 2005 г., Москва. – М.: Центр Международной торговли, 2005. – С. 63-64.
2. Казанцева Е.А., Комарова Е.Г. Влияние ультразвука при микродуговом оксидировании на формирование структуры кальцийфосфатных покрытий // Сборник трудов Междунар. научно-технической молодежной конференции «Перспективные материалы конструкционного и медицинского назначения», 26-30 ноября 2018 г., Томск, Россия. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2018. – С. 345-346.

**ВЛИЯНИЕ ПОРИСТОСТИ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ
КЕРАМИКИ $ZrO_2-Y_2O_3$**

Савченко Н.Л., Саблина Т.Ю., Севостьянова И.Н.

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск

Несмотря на потенциальные возможности увеличения прочности пористых керамических материалов на основе диоксида циркония посредством трансформационного механизма упрочнения реализовать это на практике удается далеко не всегда. Основная причина, прежде всего, в недостатке знаний об эволюции структурно-фазового состава такой пористой керамики, как на различных этапах технологического процесса синтеза материалов, так и при внешнем воздействии. На сегодняшний день остается невыясненным вопрос о реализации трансформационного упрочнения в циркониевой керамике с развитой пористой структурой.

Сложность получения высокопористой керамики на основе диоксида циркония заключается в том, что при традиционном методе частичного спекания ультрадисперсных порошков, когда средний размер пор соизмеримым со средним размером зерен, не удается получить керамику одновременно с большим объемом остаточной пористости и достаточно крупными зернами тетрагональной фазы для реализации мартенситного превращения из тетрагональной фазы в моноклинную под нагрузкой, благодаря которому происходит трансформационное упрочнение в традиционных плотных керамиках на основе диоксида циркония.

Известно, что керамику с широким диапазоном размера зерна и пористости можно получить добавлением в исходную порошковую смесь порообразующих добавок и последующим спеканием при разных температурах и временах выдержки. Вместе с тем мы не нашли в литературе данных где бы сообщалось о применении такого подхода для получения высокопористой керамики на основе диоксида циркония с размером зерен тетрагональной фазы достаточном для превращения её в моноклинную фазу под воздействием напряжений.

Цель настоящей работы – исследование влияния пористости на структурно-фазовое состояние керамики на основе стабилизированного иттрием диоксида циркония.

Для получения пористых образцов с пористостью от 2 до 45 об.% использовали смеси исходного порошка $ZrO_2-3\text{мол.}\%Y_2O_3$, и порообразователя - сферических частиц сверхвысокомолекулярного полиэтилена со средним размером частиц 45 мкм. Для получения керамики отличающейся по величине среднего размера зерна, спекание образцов на воздухе осуществляли при температурах 1500 и 1600 °С с изотермической выдержкой в течение 1, 3, 5 часов.

Показано, что в керамике на основе диоксида циркония с развитой поровой структурой пористость обуславливает понижение критического размера зерен тетрагональной фазы. По-видимому, увеличение объема пор в образце приводит к образованию свободных поверхностей, что сопровождается уменьшением локальных напряжений в плотных областях между порами и на границах типа “пора-зерно” и обуславливает уменьшение критического размера зерен тетрагональной фазы, при достижении которого происходит самопроизвольное превращение из тетрагональной фазы в моноклинную при охлаждении от температуры спекания.

Полученные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что в пористой керамике возможно трансформационное превращение, связанное с механическими напряжениями. При фиксированном значении пористости доля превращенной тетрагональной фазы увеличивается с ростом размера зерен.

DOI: 10.17223/9785946218412/293

MECHANICAL ACTIVATION OF SELF-PROPAGATING HIGH TEMPERATURE SYNTHESIS IN TITANIUM, CARBON BLACK AND IRON-BASED ALLOY POWDER MIXTURES

^{1,2}Baranovskiy A.V., ²Pribytkov G.A., ^{1,2}Krinitcyn M.G., ²Homyakov V.V., ²Dankovcev G.O.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science, Tomsk*

²*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk*

Metal matrix composites TiC-metal binder are of great interest as hard and wear-resistant coating materials. The best and well-known method to create that kind of composites is self-propagating high temperature synthesis (SHS). Binders in these composites act as thermally inert additives and from specific amount, they start to block the reaction initiation. However, the presence of a large amount of binder makes possible to obtain a composite structure strengthened by a finely dispersed carbide particles, which greatly improves the homogeneity and mechanical properties of the composite [1]. The possibility of the synthesis on samples with high inert binder content can be provided by reaction mixtures mechanical activation (MA) [2-4].

Powder mixtures of titanium (ТПМ-8, <160 μm , 99,4 %), carbon black (П-803, 0.3 μm), high-speed steel (HSS, < 56 μm), high chromium cast iron (HCCI, HCCI Russian trademark, < 56 μm) are used. The content of titanium and carbon in the reaction mixtures corresponded to the equiatomic composition of titanium carbide. Powder mixtures were prepared by dry mixing for 4 hours. Synthesis was carried out in air-tight reactor in argon gas medium under 0.5 bar excess pressure.

The mechanical activation of powder mixtures was carried out in a planetary mill "Activator - 2S" with a ball/powder ratio of 20/1. The planetary disk rotation speed varied to receive different intensities of mechanical activation: high (960 rpm - 88g) and medium (720 rpm - 49g) load.

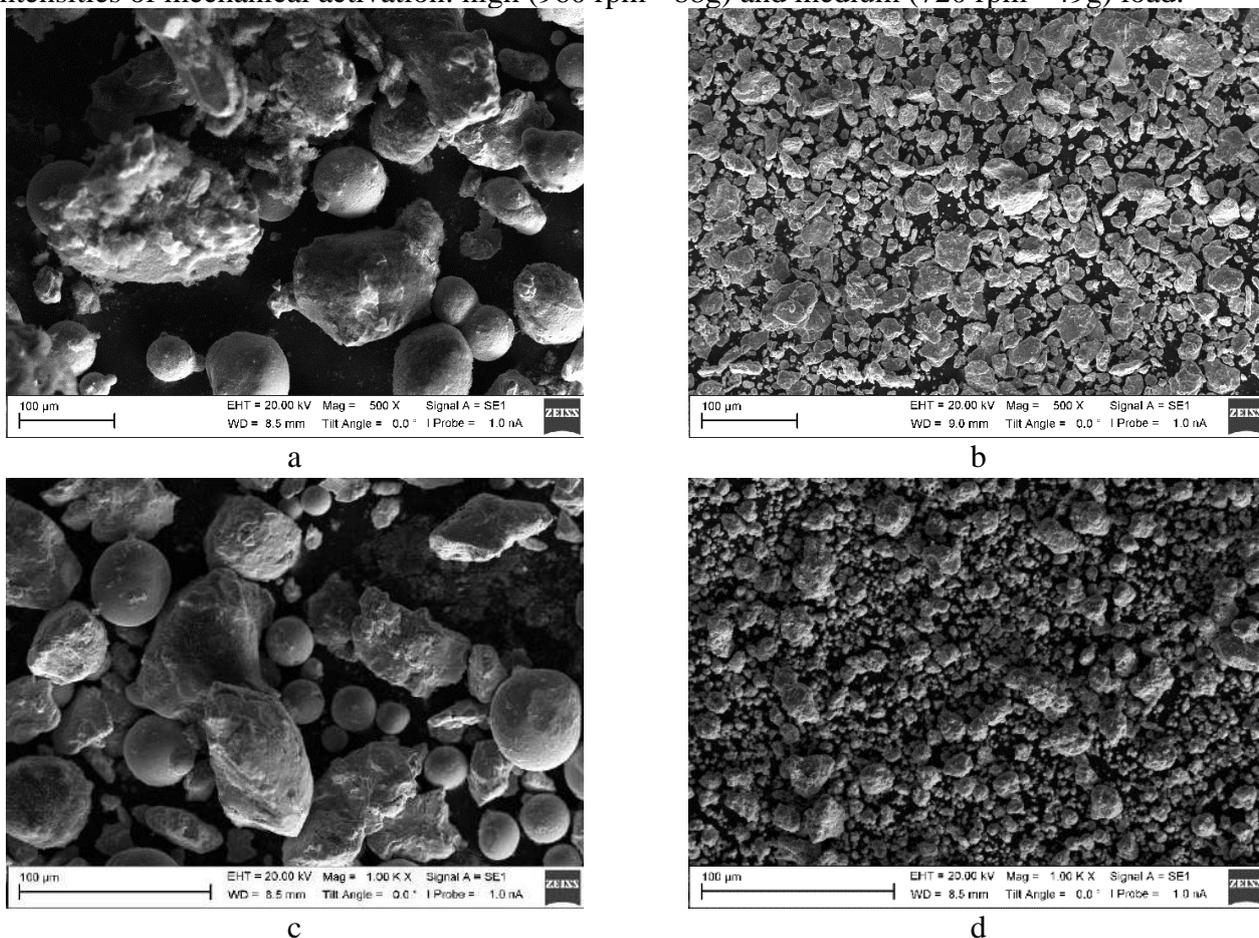


Fig 1. Structures of powder mixture before and after MA: a) Ti+C+60 vol % HSS b) Ti+C+60 vol % HSS MA (49g, 15 min) c) Ti+C+50 vol % HCCI, d) Ti+C+50 vol % HCCI MA (88g, 10min)

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

The dispersion and morphology of powder mixtures before and after mechanical activation are significantly different. After MA, the structure of the MA mixture is more dispersed and homogeneous. The steel spherical particles and large titanium powder granules are grinded and then agglomerate to granules of $24 \pm 10 \mu\text{m}$ at 49g load. Powder mixtures with cast iron has granules of $10 \pm 5 \mu\text{m}$ at 88g load. Unlike the mixture with HSS, much more granules with a size of 3-5 μm in mechanically activated cast iron mixtures are found (Fig. 1).

The powder mixture with a target content of 60 vol. % HSS did not ignite without MA (table 1), as well as with MA in medium load (15 min., 49g). At high load (10 min, 88g), the combustion front stopped by the thermocouple and the temperatures recorded in this case differed greatly from sample to sample. SHS on a 50 vol. % HSS sample without prior mechanical activation was unstable. However, after mechanical activation in medium load, the stability of the combustion of the sample was achieved and the temperature was measured with sufficient accuracy.

Table 1. Combustion temperatures of Ti+C+ HSS and HCCI.

Target phase composition	MA properties	Combustion temperature
TiC+50 vol. % HSS	No activation	1090±293°C, unstable
	MA 49g, 15min	1361±20 °C
TiC+60 vol. % HSS	MA 49g, 15 мин	No ignition
	MA 88g, 10 мин	Unstable
TiC+50 vol. % HCCI	No activation	No ignition
	MA 88g, 15 мин	No ignition
	MA 88g, 10 мин	1215±5°C
TiC+60 vol. % HCCI	No activation	No ignition
	MA 49g, 10 мин	No ignition
	MA 88g, 15 мин	No ignition

The both mixture compositions with HCCI binder without mechanical activation do not ignite. After 15 minutes high load MA (88g) of each of the compositions, the initiation of the synthesis also did not observed. The reason of such inefficiency of MA could be connected with the formation of titanium carbide layers on the surface of titanium particles with 15 minutes of processing (mechanical synthesis). These layers isolate titanium and carbon and prevent chemical reaction in wave combustion mode. Stable combustion was obtained only on the composition of TiC + 50 vol. % HCCI after high load (10min, 88g) , when the mechanical synthesis has not yet started.

Acknowledgements

The work was carried out within the framework of the Program of Fundamental Scientific Research of the State Academies of Sciences (line of research III.23) with the financial support of the Russian Foundation for Basic research (Grant No. 18-32-00330).

1. Usmani S. et al. Effect of carbide grain size on the sliding and abrasive wear behavior of thermally sprayed WC-Co coatings // Tribol. Trans. 1997. T. 40, № 3. С. 470–478.
2. Ghiasabadi S.M., Raygan S. In situ production of Fe-TiC nanocomposite by mechanical activation and heat treatment of the Fe₂O₃/TiO₂/C powder // J. Mater. Eng. Perform. 2012.
3. Bernard F., Paris S., Gaffet E. Mechanical Activation as a New Method for SHS // Advances in Science and Technology. 2006. T. 45. 979–988 с.
4. Lyakhov N. Z., Talako T. L., Grigorieva T. F. Effect of mechanical activation on the processes of phase-and structure formation during self-propagating high-temperature synthesis //Novosibirsk: Parallel. – 2008.

DOI: 10.17223/9785946218412/294

**ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА
ЖАРОПРОЧНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ЖС6У**

¹Корниенко Е.Е., ¹Рашковец М.В., ¹Лазуренко Д.В.

¹Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

На сегодняшний день изготовление деталей при помощи различных методов аддитивного производства (АП) является актуальной темой. Наиболее востребованными технологиями в настоящее время являются селективное лазерное и электронно-лучевое спекание [1]. По сравнению с традиционными способами получения деталей, АП имеет следующие преимущества: получение изделий любой формы, использование любого материала, экономия времени, гибкость и способность контролировать и оптимизировать производительность продукции [2]. Аддитивные технологии применяют для изготовления изделий сложной геометрии из специальных материалов в авиационной промышленности, космической индустрии, энергетическом машиностроении, а также биомедицине и ряде других отраслей.

Жаропрочные сплавы на основе никеля обладают превосходными механическими свойствами, высоким пределом ползучести, коррозионной стойкостью и износостойкостью. Благодаря этому, из никелевых суперсплавов изготавливают детали для высокотемпературных реактивных двигателей и газовых турбин [3]. В основном сырьем для печати является порошок марок Inconel 718 и Inconel 625 [4,5], хотя в последнее время встречается ряд работ, где в качестве прекурсора используют проволоку [5,6]. Аддитивная технология получения изделий с подачей проволоки является экономически более выгодной, за счет более низкой цены материала. Также, снижается вероятность загрязнения выращиваемого материала кислородом [2]. В отечественной промышленности широко применяют сплав ЖС6У [7]. Известно, что сплавы типа ЖС содержат небольшое количество углерода, поэтому объемная доля карбидов в этих материалах невелика (1-2 %). Основной проблемой является то, что карбиды преимущественно выделяются по границам зерен, что существенно снижает пластичность этих материалов и, как следствие, невозможность получать из него проволоку методами пластической деформации. В основном в литературе встречаются работы, посвященные изучению жаропрочных никелевых сплавов в литом состоянии, а структура и свойства никелевых сплавов типа ЖС после термической обработки затронуты незначительно. Целью настоящей работы является изучение влияния различных видов термической обработки на структурные особенности и свойства жаропрочного сплава ЖС6У.

В качестве исходного материала использовали жаропрочный никелевый сплав марки ЖС6У. Химический состав сплава (Ni – основа; 8,52 % Cr; 9,19 % W; 10,14 % Co; 6,14 % Al; 1,71 % Mo; 2,48 % Ti; 0,94 % Nb, 0,05 % Fe) соответствует ОСТ 1-90126-85. Исходный материал представлял собой цилиндр диаметром 90 мм и длиной 300 мм в литом состоянии. Образцами для структурных исследований, а также измерений микротвердости, являлись поперечные микрошлифы, подготовленные по стандартной методике: механическое шлифование и полирование с использованием суспензии, содержащей частицы Al₂O₃. Для травления микроструктуры использовали концентрированную царскую водку (HCl : HNO₃ = 3:1). Микроструктуру образцов исследовали при помощи светового микроскопа Carl Zeiss Axio Observer A1m, а также растрового электронного микроскопа Carl Zeiss EVO50 XVP. Поэлементный химический анализ выполняли на растровом электронном микроскопе Carl Zeiss EVO50 XVP с микроанализатором Oxford Instruments EDS X-Act. Режимы термической обработки исходного сплава ЖС6У были следующими: температура нагрева: 900, 1000, 1100 и 1200 °С, время выдержки 1 час, среда охлаждения: печь и вода. Термическую обработку проводили в муфельных нагревательных печах. Микротвердость образцов оценивали на микротвердомере Wolpert Group 402MVD при нагрузке 10 Н. Для определения прочностных характеристик проводили испытания на сжатие на машине сжатия Instron 3369 по ГОСТ

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

25.503-97. Скорость нагружения была равной 1 мм/мин. Для проведения испытаний из исходной заготовки вырезали гладкие цилиндрические образцы диаметром 10 мм и высотой 10 мм. Из исходной заготовки сплава ЖС6У вырезали прутки диаметром 5 мм и длиной 30 мм, которые подвергали деформированию в валках прокатного стана. Расстояние между валками уменьшали от 5 до 3 мм. Перед прокаткой образцы нагревали до 1200 °С и выдерживали 1 час.

В работе показано, что материал в литом состоянии представляет собой крупные столбчатые кристаллиты длиной до 100 мм и имеет типичное дендритно-ячеистое строение. Основными фазами являются: карбиды свободной формы типа МС, вытянутые карбиды с возможной стехиометрией $M_{23}C_6$ или M_6C , γ' -фаза и неравновесная эвтектика $\gamma'+\gamma$.

Проведение термической обработки не оказывает влияния на макроструктуру образцов: дендритно-ячеистое строение сохраняется. Увеличение температуры нагрева при отжиге и закалке не оказывает влияния на размеры карбидных частиц. Закалка при температуре 1200 °С позволяет получить минимальный размер γ' -фазы (менее 0,3 мкм) и минимальную ее объемную долю.

Измерениями микротвердости показано, что наибольший уровень микротвердости составляет 598 HV и соответствует образцам после закалки при 900 °С. Минимальные значения микротвердости характерны для образцов после закалки при температуре 1200 °С (449 HV). При испытаниях образцов на сжатие было выявлено, что предел прочности образцов всех образцов находится примерно на одном уровне (1900-2100 МПа). Установлено, что разрушение образцов обусловлено наличием карбидов, выделяющихся по границам ячеек дендритов.

Пластическая деформация образцов, нагретых до 1200 °С и выдержанных 1 час, проходит с образованием трещин. Таким образом, проводить пластическое деформирование сплава подобного химического состава нецелесообразно. Для получения филаментов рациональнее использовать литейную технологию.

Благодарности

Научные исследования выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)".

1. И. Ю. Смулов, С. Г. Конов, Д. В. Котобан, *Новости материаловедения. Наука и техника*, 4-14 11-22 (2015).
2. Q. Guan, *Автоматическая сварка*, 10-11 33-37 (2013).
3. С. Radhakrishna, K. P. Rao, *Journal of Material Science*, 32-8 1977-1984 (1997).
4. M.M. Kirka, F. Medina, R. Dehoff, A. Okello, *Materials Science and Engineering: A*, 680 338-346 (2017).
5. F. Xu, Y. Lu, Y. Liu, B. Xub, P. Heb, *Physics Procedia* 50, 48-54 (2013).
6. X. Wang, T. Keya, K. Chou, *Procedia Manufacturing* 5, 1006-1017 (2016).
7. Е. Н. Еремин, Ю. О. Филиппов, Г.Н. Миннеханов, Б.Е. Лопав, *Омский научный вестник*, 1-117 63-68 (2013).
8. Б. А. Колачев, В. И. Елагин, В. А. Ливанов, *Металловедение и термическая обработка цветных металлов и сплавов* (М.:МИСИС, 1999) 416 с.
9. Н. Kitaguchi, *In book: Metallurgy - Advances in Materials and Processes*. (2012). P. 19-42.
10. R. Dong, J. Li, T. Zhang, R. Hu, H. Kou, *Materials Characterization* 122 189-196 (2016).
11. G. Tian, C. Jia, Y. Wen, *Rare Metals* 27 410-417 (2008).
12. Е. Н. Еремин, Ю. О. Филиппов, Н. А. Давлеткильдеев, Г. Н. Миннеханов, *Омский научный вестник* 1-97 24-29 (2011).

DOI: 10.17223/9785946218412/295

ФОРМИРОВАНИЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ МЕТОДАМИ МЕТАЛЛ-СТИМУЛИРОВАННОГО ХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ

Круковский К.В., Кашин О.А., Лотков А.И.

Институт физики прочности и материаловедения, Томск

В настоящее время пористый кремний рассматривается [1] как перспективный материал-носитель для адресной доставки лекарств. Для доставки лекарственного препарата используют, как правило, частиц кремния с поровой структурой. С помощью специальных методик эти частицы доставляются в конкретное место, например, в раковую опухоль, где требуется лекарственное воздействие. Надежная оценка эффективности разрабатываемых противоопухолевых препаратов и методик лечения онкологических заболеваний, в том числе направление, связанное с таргетной доставкой материалов-носителей, содержащих противоопухолевые лекарственные препараты, обеспечивающих пролонгированное лечебное воздействие является актуальной проблемой.

Чтобы обеспечить выделение лекарственного препарата после доставки в течение заданного промежутка времени, который определяется в зависимости от назначения препарата, контейнерный материал должен обладать определёнными характеристиками. Во многом эти характеристики определяются параметрами поровой структуры. Международным союзом теоретической и прикладной химии (IUPAC) в 2001 году была принята классификация пористых материалов по размерам (поперечному диаметру) пор без учёта их морфологии [2]: микропористые (с порами менее 2 нм); мезопористые (с порами от 2 до 50 нм); макропористые (поры более 50 нм).

Целью работы являлась отработка методики получения контейнерных материалов на основе пористого кремния с различными параметрами поровой структуры для последующей разработки *in vitro* методики оценки эффективности действия противоопухолевых препаратов.

Для получения пористой структуры в кремнии использовались двухстадийный метод металл-стимулированного химического травления (metal-assisted chemical etching (MACE)) и метод электрохимического травления. На первой стадии метода MACE частицы серебра осаждались на поверхности кремниевых пластин из раствора (1 мМ AgNO₃ и 0,5 об.% HF) в течение 15 с (режим I), 30 с (режим II), и 45 с (режим III). На второй стадии в растворе (12 об.% HF, 3 об.% H₂O₂ и деионизированная вода) происходило образование пор в течение 6 часов. Для метода MACE использовались пластины Si (100) N-типа (8 Ом см). Кремниевые пластины имели диаметр 20 мм и толщину 2 мм. Электрохимическое травление проводили в однокамерной ячейке в растворе HF: CH₂CH(OH)CH₂: H₂O = 1: 1: 18. Время обработки составляло от 2 до 3 часов. Плотность тока составляла $j = 20-100$ мА / см². Для метода электрохимического травления использовались пластины Si (100) P-типа (0,005 Ом см). Кремниевые пластины были квадратными с размерами 15 × 15 мм и толщиной 0,25 мм.

После завершения первой стадии методики MACE было проанализировано распределение частиц по размерам и особенности их расположения на поверхности кремния в зависимости от времени процесса. Показано, что частицы имеют одинаковый характер распределения по размерам и близкий по значениям средний диаметр независимо от времени формирования частиц серебра. С увеличением времени осаждения на первой стадии метода MACE увеличивается количество частиц на поверхности образцов и происходит их конгломерация; размер данных конгломератов тем больше, чем больше время осаждения. Поры на поверхности образцов расположены отдельно друг от друга и имеют округлую форму со средним диаметром 300 нм. Кроме того, встречаются поры большего «диаметра», но эти поры не имеют округлой формы и образуются из сообщающихся пор меньшего диаметра. Такие поры – результат конгломерации частиц серебра. Сформированная по режиму I пористая структура имеет пористость ~ 24 %. По всей видимости, частицы, которые образуют конгломераты после первой стадии осаждения, далее формируют поры в соответствии с

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

размером данного конгломерата, то есть действуют как одна частица. Этот механизм также наблюдается на образцах, полученных по режимам II и III: с увеличением времени выдержки на первой стадии, увеличивается плотность частиц, количество и размер конгломератов. В результате количество пор, образованных единичными частицами уменьшается, а количество пор образованных конгломератами частиц увеличивается. Такой механизм подтверждается тем, что на дне пор образцов, полученных по режиму I, наблюдаются в основном единичные частицы серебра, а в образцах, полученных по режимам II и III, на дне пор наблюдаются конгломераты частиц. Конгломераты частиц серебра на дне пор тем больше, чем больше время осаждения на первой стадии метода МАСЕ. Обнаружено, что толщина пористого слоя независимо от времени осаждения серебра составила 95 мкм. В поверхностных слоях пористого слоя при всех режимах наблюдаются поры параллельные поверхности образца, которые пересекают основную пористую структуру. Диаметр, длина и количество данных пор было тем больше, чем больше размер конгломератов частиц, образовавшихся на поверхности образцов на стадии осаждения частиц серебра.

Для реализации электрохимического способа получения пористого кремния была изготовлена однокамерная ячейка. Корпус ячейки в виде стакана выполнен из фторопласта. На дне стакана по центру дна расположено отверстие. Кремниевая пластина размещается под стаканом по центру отверстия, прокладка из кислотостойкой резины располагается между кремниевой пластиной и стаканом. Пластина из кремния поджимается снизу алюминиевой пластиной, которая является электродом. Противоположный электрод выполнен из платиновой проволоки в виде спирали.

Методом электрохимического травления пористую структуру формировали в образцах по двум схемам. По первой схеме формировали слой определённой толщины, по второй схеме формирование пористого слоя происходило на всю толщину кремниевой пластины. Было сделано предположение, что сквозная пористая структура, сформированная по второй схеме, будет лучше адсорбировать лекарственные препараты. Методом электрохимического травления была сформирована пористая структура со средним размером пор на поверхности около 12 нм и общей пористостью 72 %, Толщина пористого слоя составила ~ 170 мкм. Однако при попытках изготовить образцы по второй схеме пористый слой разрушался. По всей видимости, это происходило по причине действия сил поверхностного натяжения при высыхании электролита после формирования пористой структуры.

Установлено, что методами металл-стимулированного химического (МАСЕ) и электрохимического травления с использованием оригинальных химических растворов и параметров процесса в кремниевых пластинах можно целенаправленно формировать пористые структуры в слоях заданной толщины и с определённой пористостью. Показано, что методом МАСЕ при использованных химических растворах и параметрах травления можно сформировать пористую структуру в образцах кремния в слое толщиной до 100 мкм с пористостью от 24 до 57 %, а методом электрохимического травления удаётся получить пористую структуру с пористостью 72% в слое толщиной до 170 мкм. Полученные данные позволяют сделать вывод о перспективности использования оригинальных химических растворов и параметров травления для разработки лабораторной технологии изготовления образцов кремния с заданными параметрами пористой структуры. Эти образцы в дальнейшем могут быть использованы в качестве контейнерных материалов для лекарственных препаратов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (идентификатор проекта RFMEFI60718X0202).

1. D Savage, X Liu, S Curley, M Ferrari, R Serda, *Current Opinion in Pharmacology* 13, pp. 1–8 (2013)
2. Nomenclature of structural and Compositional Characteristics of Ordered Microporous and Mesoporous Materials with Inorganic hosts (IUPAC Recommendations 2001), *Pure Appl. Chem.* pp. 381–394.

DOI: 10.17223/9785946218412/296

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК И ФАЗОВОГО СОСТАВА В ПОКРЫТИЯХ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ НАПЛАВКЕ ПОРОШКОВОЙ СМЕСИ $\text{Cr}_3\text{C}_2 + \text{TiC}$ НА НИЗКОУГЛЕРОДИСТУЮ СТАЛЬ ПУЧКОМ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Иванов К.В., Овчаренко В.Е.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск

Использование обработки поверхности материала пучком релятивистских электронов, выведенным в атмосферу, для создания твердых, износостойких и коррозионностойких покрытий на дешевых широко распространенных материалах, например, низкоуглеродистой стали, является перспективным способом улучшения их эксплуатационных свойств. Сочетание воздействия электронного пучка с внесением или созданием упрочняющих фаз (то есть формирование наплавов) позволяет создавать высоколегированные внесенными элементами покрытия на основе железа. Как правило, при описании структуры и фазового состава покрытий используют характеристики структуры, полученные в локальных областях покрытия, либо некоторые усредненные по толщине величины. Рассмотрение распределения структурных и фазовых характеристик в толстом наплавленном слое представляет существенный интерес, однако оно зачастую остается за рамками исследований. В связи с этим в настоящей работе исследованы структурные особенности и фазовый состав покрытий, сформированных на низкоуглеродистой стали при наплавке смеси $\text{Cr}_3\text{C}_2 + \text{TiC}$ пучком релятивистских электронов, в зависимости от плотности введенной энергии, а также их распределение по глубине покрытия.

Показано, что распределение характеристик структуры, фазового состава и концентрации легирующих элементов в наплавленном покрытии $\text{Cr}_3\text{C}_2 + \text{TiC}$ на низкоуглеродистую сталь зависит от плотности введенной энергии. При минимальных исследованных величинах плотности энергии неоднородность в распределении фазового состава и концентрации легирующих элементов выражена в максимальной степени. При средних плотностях энергии покрытия демонстрируют максимально однородное распределение фазового состава и легирующих элементов. При максимальных плотностях энергии распределение легирующих элементов остается однородным, но возникает неоднородность в распределении фазового состава. Установлено, что однородность распределения фаз и легирующих элементов в покрытии определяется временем существования ванны расплава и толщиной расплавленного слоя. Увеличение времени существования ванны расплава способствует равномерному распределению фаз и легирующих элементов в покрытии. Увеличение толщины расплавленного слоя приводит к возникновению градиента температур по толщине покрытия, что вызывает неоднородное распределение фаз.

DOI: 10.17223/9785946218412/297

ВЛИЯНИЕ ТИПА И ЗАМЕРА НАПОЛНИТЕЛЕЙ, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ОБРАБОТКОЙ СИЛАНСОДЕРЖАЩИМ МОДИФИКАТОРОМ КН550, НА МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СВМПЭ

^{1,2}Панин С.В., ²Хуан Цитао, ¹Корниенко Л.А., ^{1,2}Буслович Д.Г., ^{1,2}Алексенко В.О.

¹ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

²ФГАОУ ВО Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) обладает рядом уникальных свойств (износостойкость, низкий коэффициент трения, биоинертность), определяющих его приоритетные области промышленного и медицинского применения. Однако неполярность СВМПЭ обуславливает низкую межфазную адгезию композитов на его основе. Обработка наполнителей с помощью силансодержащих модификаторов способна улучшить совместимость и адгезию к полимерной матрице, приводя одновременно к повышению механических и триботехнических свойств СВМПЭ – композитов.

В настоящей работе поставлена задача повышения адгезии между матрицей СВМПЭ и наполнителями различного типа и размерности (микроволокна волластонита, микропорошок оксигидроксида алюминия, рубленые стекловолокна) путем их функционализации обработкой промышленно выпускаемым силансодержащим модификатором КН550 и сравнение влияния аппрета на трибомеханические свойства СВМПЭ – композитов, содержащих различные по составу и размеру наполнители. Наиболее эффективным промышленно выпускаемым промоутером адгезии для композитов на основе СВМПЭ является аппрет КН550.

В работе использовали порошки СВМПЭ фирмы Ticona (GUR-2122) с молекулярной массой 4,5 млн и размером отдельных частиц 5 мкм (слабо агломерированных в крупные фрагменты размером до 120-150 мкм), микроволокна волластонита длиной 30 мкм и диаметром 4 мкм (аспектное соотношение 7,5:1), микропорошок метагидроксида алюминия AlO(OH) размером частиц 2-3 мкм, рубленые стекловолокна (PCB) длиной 2 мм (поставщик ООО «Графит Про», Москва) и силансодержащий модификатор КН550 (ООО Дунгуань, Китай), представляющий собой 3-аминопропилтриэтоксисилан (химическая формула NH₂CH₂CH₂CH₂Si(OC₂H₅)₃).

Для удаления изначально содержащегося на поверхности стекловолокон (технологического) замасливателя проводили их отжиг на воздухе при температуре 300 °С. Функционализацию наполнителей осуществляли путем их обработки в водно-этанольных (рН = 4,5...5,5) растворах модификатора КН550 при комнатной температуре при непрерывном перемешивании в течение 30 мин. Содержание реагента составляло 1 % от массы наполнителя (0,1 вес. % от общей массы). Затем суспензию высушивали в тепловом шкафу при температуре T=100 °С до полного выпаривания жидкости.

Объемные образцы композитов получали горячим прессованием. Износостойкость образцов в режиме сухого трения определяли по схеме «вал-колодка» при нагрузках на образец размером 15,8×6,4×10,0 мм³ при P=60 и 140 Н и скоростях скольжения V=0.3 и 0,5 м/с на машине трения СМТ-1 (согласно ASTM G99/DIN 50324). Диаметр контртела (вала) из стали ШХ15 составлял 35 мм. Величину объемного износа определяли по глубине дорожки трения с помощью контактного профилометра Alpha-Step IQ (KLA-Tencor). Коэффициент трения определяли с помощью трибометра CSEM CH 2000 (по схеме «шар-по-диск»; нагрузка P=5 Н, скорость скольжения V=0.3 м/с). Структурные исследования проводили на растровом электронном микроскопе LEO EVO 50 при ускоряющем напряжении 20 кВ по поверхностям скола, полученным механическим разрушением образцов с надрезом, предварительно выдержанных в жидком азоте.

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Исследованы трибомеханические характеристики композитов на основе СВМПЭ с функционализированными наполнителями (порошковый оксигидроксид алюминия, волокна волластонита, рубленое стекловолокно) в различных условиях трибонагружения ($P \cdot V$). Показано, что аппретирование наполнителей является эффективным способом повышения износостойкости композитов на основе СВМПЭ с порошковым и волокнистыми наполнителями (увеличение износостойкости от 1,5 до 3,6 раз). На основании результатов, полученных в работе, можно рекомендовать для антифрикционных приложений в трибоузлах композиты на основе СВМПЭ с функционализированными аппретом КН550 наполнителями (порошковыми, волокнистыми) в широком интервале нагрузок и скоростей скольжения.

DOI: 10.17223/9785946218412/298

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО УПРОЧНЕНИЯ, ВЫЗВАННОГО ПОПЕРЕЧНО ВИНТОВОЙ ПРОКАТКОЙ, НА УДАРНУЮ ВЯЗКОСТЬ СТАЛИ 09Г2С

¹Смирнова А.С., ¹Власов И.В., ²Сурикова Н.С.,

²Яковлев А.В., ²Мишин И.П., ^{1,2}Панин С.В.

¹Томский политехнический университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Магистральные трубопроводы являются стратегическими промышленными объектами, а контроль их технического состояния, а также исследование способов сохранения/повышения эксплуатационных характеристик являются актуальными научно-техническими задачами [1]. В то же время, основными факторами, приводящими к выходу из строя элементов трубопровода, являются коррозионный износ в процессе эксплуатации, деформационное старение [2], вызванное продолжительным воздействием статической нагрузки, низкие температуры, приводящие к резкому снижению ударной вязкости [3] и др.

Для решения проблемы повышения ударной вязкости в работе предложен метод поперечно винтовой прокатки (ПВП), заключающийся в прокате цилиндрической заготовки тремя валками, вращающимися в одном направлении и установленными под углом друг другу. При этом происходит вращение заготовки относительно собственной оси таким образом, что любая точка поверхности движется по винтовой траектории. Предварительно подобранные температурно–деформационные режимы воздействия позволяют создавать в объёме материала многоуровневую структуру с высокими диссипативными свойствами (за счет реализации эффекта кривизны кристаллической решетки и формирования двухфазной ламеллярной мезоскопической структуры), обеспечивающие эффективное демпфирование быстроподводимой механической энергии (при ударных испытаниях), а также подавляющие локализацию пластического течения и эффективно сдерживающие зарождение и распространения трещин при динамических нагружениях [4].

В качестве объекта исследования была выбрана конструкционная низколегированная сталь 09Г2С, широко применяемая как при строительстве трубопроводных систем, так и для элементов несущих конструкций различного назначения. ПВП проводили на трёхвалковом стане. Было выполнено 5 проходов от температуры 850 С с закалкой в воду после каждого прохода ($E_{сумм}=73,77\%$). Целью данного исследования является изучение влияния поперечно-винтовой прокатки на структуру и ударную вязкость стали 09Г2С. После ПВП в продольном и поперечном направлении в поверхностном слое формируется мелкодисперсная структура, состоящая из феррита и разрушенных пластин перлитной фазы (рисунок 1, а).

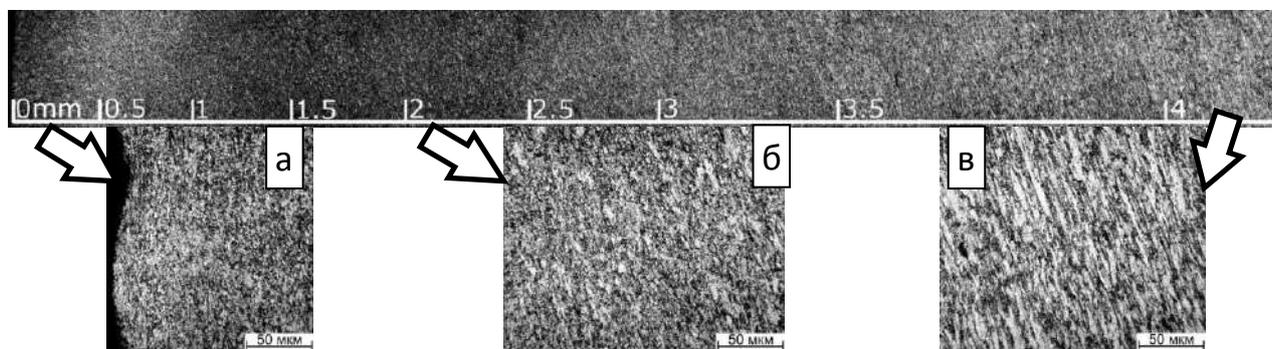


Рис. 1 - Фотографии микроструктуры стали 09Г2С после поперечно винтовой прокатки

На глубине более 1 мм в продольном направлении становятся различимы отдельные вытянутые ферритные зёрна (рисунок 1, б, в), сохранившиеся после деформации. В поперечном направлении такие зёрна выглядят как равноосные светлые фазы. При дальнейшем перемещении к центру прутка фиксируется увеличение размера и количества различных вытянутых ферритных зёрен, а на расстоянии от 4 мм хорошо заметна

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

сформированная текстура. В поперечном направлении на данной глубине различимы фазы феррита и перлита. В результате деформации при ПВП «размываются» перлитные прослойки между ферритными зёрнами (в отличие от образцов в состоянии поставки), а границы фаз выглядят более «рваными».

В результате пятиступенчатой прокатки удалось повысить ударную вязкость на всём исследуемом температурном интервале (до $-70\text{ }^{\circ}\text{C}$) (рисунок 2, а). Рассчитана величина энергии, затраченной на зарождение и распространение трещины (рисунок 2, б, в). Показано, что основной причиной повышения ударной вязкости после прокатки является эффективное сопротивление распространению трещины, что видно по отношению затраченной энергии на данном этапе (рисунок 2, в), в то время как на этапе зарождения трещины значения энергий для обоих типов образцов достаточно близки (рисунок 2, б).

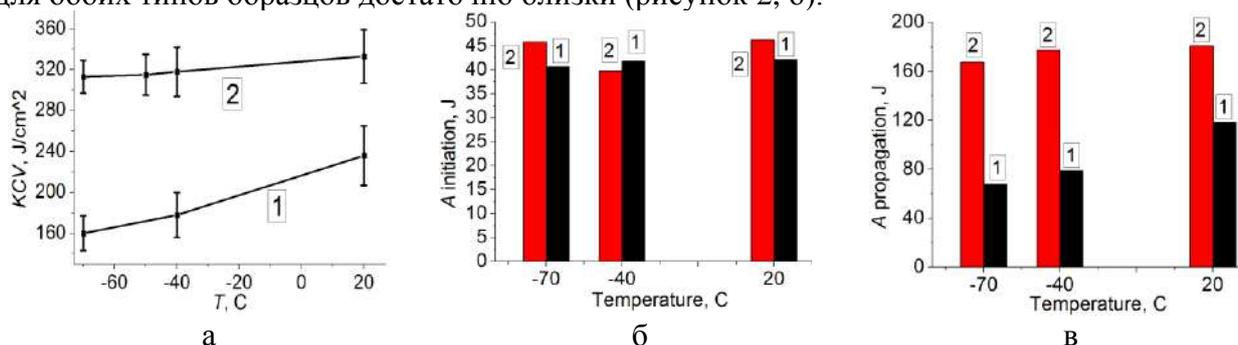


Рис. 2 - а) график ударной вязкости; б) работа зарождения трещины; в) работа распространения трещины; 1 - исходное состояние; 2 - образец после ПВП

В процессе поперечно винтовой прокатки стали 09Г2С развиваются эффекты деформационного упрочнения, что сопровождается уменьшением размера зерна, формированием текстуры с градиентным изменением по сечению прутка, а также формированием текстуры в продольном направлении. Тем самым, образцы Шарпи характеризуются более прочным поверхностным слоем и более вязким материалом в сердцевине. Такое сочетание позволяет более эффективно сопротивляться распространению трещины и приводит к практически двукратному повышению ударной вязкости при отрицательных температурах.

Благодарности: Работа выполнена в рамках плана фундаментальных научных исследований государственных академий наук 2013-2020 гг. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 18-38-00679 и 18-08-00516, а также грантов президента НШ-5875.2018.8 и СП-2456.2019.1.

1. Панин В.Е., Деревягина Л.С., Лебедев М.П., и др. Научные основы хладноломкости конструкционных сталей с ОЦК кристаллической решеткой и деградации их структуры при эксплуатации в условиях отрицательных температур // Физ. мезомех. 2016. Т. 19. № 2. С. 5-14
2. Syromyatnikova A. S. Degradation of physical and mechanical condition of the main gas pipeline metal at long operation in the conditions of the cryolitozone // Phys. Mesom. 2014. Vol. 17. Issue 2. P. 85-91 (in Russian).
3. Nastich S. Yu., et. al. Effect of temperature for the start of finish rolling on coiled steel X70 microstructure and cold resistance. 2012. Volume 56. Issue 7. P 519–525.
4. Пищулова А.А., Гордиенко А.И., Деревягина Л.С. Влияние температурных режимов поперечно-винтовой прокатки на особенности формирования структуры и механические свойства низкоуглеродистой трубной стали // Труды конференции: Перспективные материалы конструкционного и медицинского назначения. 2018. С. 76-77.

DOI: 10.17223/9785946218412/299

РАЗВИТИЕ ОБРАТИМОЙ НЕУПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ДВОЙНОМ СПЛАВЕ НА ОСНОВЕ TiNi ПРИ ИЗОТЕРМИЧЕСКОМ МЕХАНОЦИКЛИРОВАНИИ ИЗГИБОМ ОБРАЗЦОВ В B2 ФАЗЕ

Тимкин В.Н., Гришков В.Н., Лотков А.И., Жапова Д.Ю.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

При эксплуатации изделий из сплавов на основе никелида титана в качестве датчиков или исполнительных устройств (актюаторов) они могут подвергаться циклическому нагреву и охлаждению под нагрузкой, либо в свободном состоянии, а также многократно подвергаться нагружению и разгрузке в изотермических условиях. При этом структурно-фазовое состояние сплава многократно изменяется в ходе этих циклов, что приводит к фазовому наклепу и изменению функциональных свойств сплава, таких как эффект памяти формы (ЭПФ) и сверхэластичность. Для стабильной работы изделий на основе TiNi необходимо, чтобы характеристики этих сплавов не изменялись в процессе эксплуатации.

Цель данной работы – исследовать закономерности накопления и возврата обратимой неупругой деформации в виде эффекта памяти формы и сверхэластичности в образцах двойного сплава Ti49.3Ni50.7 (ат.%) в процессе их изотермического (295К) механоциклирования при деформировании образцов изгибом.

Образцы сплав Ti49.3Ni50.7 (ат.%) в виде пластин (ширина 2 мм, толщина ~1 мм, длина 45 мм) испытывали изгибом в оснастке с V-образным каналом (угол между стенками канала 90°) при нагружении образцов цилиндрами заданного радиуса. Сплав имел крупнозернистую структуру (зёрна 20-30 мкм). Изотермические циклы «нагружение-разгрузка» проводили при температуре 295К.

Возврат деформации при разгрузке после нагружения до заданной деформации ϵ_t принимали равным величине эффекта сверхэластичности. При последующем нагреве разгруженных образцов определяли возврат деформации, связанный с реализацией ЭПФ, обусловленного обратным превращением деформационного мартенсита B19' в B2 фазу. Остаточная деформация после завершения формовосстановления образца при нагреве до 493К соответствует пластической деформации, развивающейся в процессе нагружения образцов до ϵ_t . Таким образом, в цикле «нагружение-разгрузка» с последующим нагревом разгруженных образцов выявляются все составляющие заданной при нагружении образцов деформации ϵ_t . При каждом значении ϵ_t (4.5% и 20.2%) проводили 11 механоциклов нагружения образцов изгибом и их разгрузки на отдельно взятых образцах. В сплаве при охлаждении и нагреве реализовывались мартенситные превращения (МП) B2 \leftrightarrow B19' ($M_s=252K$, $M_f=223K$, $A_s=258K$, $A_f=273K$). Таким образом, температура, при которой проводили испытания образцов (295К), находится выше A_f , то есть образцы имели структуру B2 фазы.

При деформации образцов изгибом на 4.5% с увеличением числа циклов «нагружение-разгрузка-нагрев» наблюдается плавное уменьшение величины суммарной неупругой деформации и плавное увеличение пластической деформации. Однако, даже после одиннадцатого механоцикла величина пластической деформации не превышает 1%. При этом величина ЭПФ не превышает 0.2% и слабо зависит от количества механоциклов. Зависимость величины эффекта сверхэластичности, от числа механоциклов практически полностью повторяет по форме зависимость суммарной неупругой деформации. Это указывает на то, что при деформации изгибом на 4.5% практически вся неупругая деформация в интервале от 1 до 11 механоциклов возвращается в режиме проявления эффекта сверхэластичности.

При деформации изгибом на 20.2% уже после первого механоцикла величина ЭПФ достигает 4.8% и приближается по величине к эффекту сверхэластичности равному 6.2%. При этом суммарная обратимая неупругая деформация достигает 11% и соответствует максимально возможному кристаллографическому ресурсу мартенситной деформации в сплаве Ti49.3Ni50.7 (ат.%), который определяется деформацией кристаллической решётки B2 фазы при МТ B2 \rightarrow B19'. На втором цикле деформации происходит резкое уменьшение величины ЭПФ. При этом величина эффекта сверхэластичности после второго механоцикла наоборот повышается. Однако дальнейшее увеличение количества механоциклов при $\epsilon_t=20.2\%$ приводит к снижению величины эффекта сверхэластичности и её слабой зависимости от числа механоциклов.

Обсуждаются физические факторы, обуславливающие наблюдаемые различия влияния механоциклирования при малых и больших заданных деформациях на проявление эффектов сверхэластичности и памяти формы.

Секция 5. Деградация тонких пленок
и многослойных покрытий как иерархически
организованных структур

DOI: 10.17223/9785946218412/300

THE DEGREE OF POLYMER OXIDATION AND ITS EFFECT ON STRUCTURE AND PROPERTIES OF LDPE FILMS

^{1,2}Zykova A.K., ^{1,2}Pantyukhov P.V., ¹Monakhova T.V.,
¹Shatalova O.V., ¹Krivandin A.V., ^{1,2}Popov A.A.

¹*Emanuel Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow*

²*Plekhanov University of Economics, Moscow*

Low density polyethylene (LDPE) is the most commonly used polymer material. It has many advantages, such as low cost, good moisture and chemical resistance, availability of grades, which are permitted for food packaging and etc. Nevertheless, the biggest disadvantage of LDPE usage is its high stability to environmental degradation, which is the main reason of increasing polymer wastes.

Polymeric materials released into environmental media (soil or water) can be degraded under following factors: air, temperature, moisture, light (photo degradation), high energy, microorganisms and insects. These factors can influence on structure and properties of LDPE solely or as a combination.

The process of biodegradation consists of two or more consecutive stages. Firstly, abiotic (photo or thermo) oxidation takes place, then microbial biodegradation occurs. Initial abiotic oxidation is an important stage as it determines the rate of the entire process. In this first period, oxygen consumption by the carbon backbone influences on the formation of functional groups, such as carboxylic acids, esters, or aldehydes and alcohols as well. The hydrocarbon polymers change their behavior from hydrophobic to hydrophilic, and chain scission can be provoked. In the second stage, these fragments can be degraded by microorganisms' enzymes in soil or during composting.

The aim of the study was to examine how the degree of oxidation influenced on structure and properties of LDPE films and how it correlated with biodegradation process of composites on its basis.

Low-density polyethylene (LDPE) 15803-020 produced according to GOST 16337-77 by Neftekhimsevilin, LLC in Kazan, Russia was used for the study. The properties are as follows: density $0.919 \pm 0.002 \text{ g/cm}^3$, melting temperature $107 \text{ }^\circ\text{C}$, $\chi = 26 \pm 1\%$, $M_w = 1.0 \times 10^5$.

The films were pressed by a manual hydraulic press VNIR PRG-1-10 at $135 \text{ }^\circ\text{C}$ under 7 kN for 3 min followed by rapid cooling.

The temperature was set at $85 \text{ }^\circ\text{C}$ for LDPE in order to accelerate the oxidation process and examine the polymer stability in the solid phase, below the melting point. Samples of material were placed in the vessels in which the oxygen was under the pressure of 66 kPa. The vessels were placed in thermostat heated to a specific temperature. The intensity of the oxygen absorption by material was fixed during a certain time interval. Based on the data the kinetic curves of oxygen absorption were plotted. Volatile components were captured by potassium hydroxide. The experiment was carried out for 50, 100, 200, 300 and 400 hours respectively. As a reference, the other range of polyethylene samples was prepared. The hold up time was the same, but films were annealed at $85 \text{ }^\circ\text{C}$ in argon and under the pressure of 500 mm Hg in order to establish the impact of annealing on LDPE structure and properties.

X-ray diffraction measurements at wide angles were made on an HZG4 modernized X-ray diffractometer (Freiberger Präzisionsmechanik, Germany) in the Bragg-Brentano configuration, with a scintillation X-ray detector and a diffracted beam graphite monochromator ($\text{CuK}\alpha$ radiation). The average crystallite sizes were calculated from the width of diffraction lines by the Selyakov-Scherrer formula on making a correction for the instrumental line broadening.

Thermophysical parameters (polyethylene melting temperature and degree of crystallinity) were examined by differential scanning calorimeter Netzsch 214 Polyma (Germany). The temperature and melting enthalpy were calibrated with an indium standard. The mass of all samples encapsulated into aluminum flat pans was kept about 7 mg.

Секция 5. Дегградация тонких пленок и многослойных покрытий как иерархически организованных структур

The kinetic curves of oxygen absorption of LDPE samples were obtained. There were 6 similar samples of pure LDPE held in the same conditions for different time intervals. The overlay of kinetic curves shows high capability of reproducing. In addition, there was no change in oxygen absorption for annealed PE in argon atmosphere.

In order to characterize the specifics of mechanism of thermal oxidation the anamorphosis of LDPE kinetic curve was plotted. The linear character of anamorphosis indicated that termination step was followed by quadratic chain-breaking process. In other words, the rate of chain-breaking process was corresponded to squared root from initiation stage rate.

To examine the changes in structure of crystallites in the LDPE samples, the method of X-ray diffraction (XRD) analysis was used. The diffraction pattern of LDPE had at wide X-ray scattering angles distinct diffraction lines corresponding to the crystalline phase of this polymer with an orthorhombic unit cell.

The crystallinity degree and average crystallite sizes were calculated from the width of (110) diffraction line. Crystallinity degree of oxidized LDPE increased with hold-up time. The values of crystallinity degree of annealed LDPE at first increased, but then varied in margin error. It can be explained by both annealing of amorphous areas and ordering of paracrystalline areas in polymer. It was concluded that the influence of oxygen on increase in crystallinity degree of LDPE was caused mainly by temperature factor. The average crystallite sizes of annealed and oxidized LDPE samples changed in margin error. The more exposure time was, the more average crystallite sizes were.

In order to establish the impact of oxygen and temperature factors on thermophysical properties of LDPE samples the differential scanning calometry in non-isothermal mode was applied.

It was found, that as oxidation time increased, crystallinity degree of oxidized LDPE samples rose. This increase can be attributed mainly to orderning of amorphous regions of polymer. The values of annealed PE samples varied insignificantly in dependence to annealing time.

DOI: 10.17223/9785946218412/301

**ВЛИЯНИЕ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ СЛОЕВ Ti-Al НА РАЗРУШЕНИЕ
МНОГОСЛОЙНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ Ti-Al-N ПРИ ОДНООСНОМ
РАСТЯЖЕНИИ И ИХ СТОЙКОСТЬ К ОКИСЛЕНИЮ**

Шугуров А.Р., Кастеров А.М., Кузьминов Е.Д.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Нанесение многослойных композиций, в составе которых чередуются слои материалов, характеризующихся различными типами химической связи, является одним из наиболее перспективных направлений повышения физико-механических характеристик защитных покрытий. В частности, введение вязких металлических слоев между хрупкими керамическими слоями позволяет существенно повысить трещиностойкость покрытий за счет диссипации энергии деформации при распространении в них вертикальных трещин. Кроме того, металлические слои способствуют релаксации напряжений в покрытиях, увеличению их твердости, а также подавляют рост столбчатых зерен, которые обеспечивают быстрое распространение трещин в глубь покрытия по границам зерен. Однако, учитывая большое число материалов, используемых для нанесения многослойных покрытий, свойства которых варьируются в широких пределах, на сегодняшний день отсутствует однозначное представление об оптимальной архитектуре подобных структур. Поэтому для определения оптимальных параметров требуются детальные исследования их поведения при различных внешних воздействиях. Целью данной работы является исследование механизмов разрушения и стойкости к окислению многослойных покрытий Ti-Al-N/Ti-Al.

Покрытия Ti-Al-N/Ti-Al наносили методом магнетронного распыления на подложки из стали 12X18H9T и ситалла. Для улучшения адгезии покрытий перед их напылением подложки подвергали очистке пучками ионов Ag^+ . Слои Ti-Al напыляли в атмосфере Ar. Осаждение слоев Ti-Al-N проводили в смеси газов $Ar+N_2$. Общее давление газов в рабочей камере в обоих случаях составляло 0,3 Па. Покрытия наносили на подложки, подогретые до температуры 280 °С. Были исследованы пять различных типов покрытий: однослойное покрытие Ti-Al-N и 4 многослойных композиции Ti-Al-N/Ti-Al, количество слоев в которых изменялось от 7 до 21, а соотношение толщин керамических и металлических слоев варьировалось от 3:1 до 1:2 (см. таблицу 1).

Таблица 1. Количество и толщина слоев в покрытиях на основе Ti-Al-N

Покрытие	Количество слоев $Ti_{0,45}Al_{0,55}N /$ $Ti_{0,45}Al_{0,55}$	Толщина слоев $Ti_{0,45}Al_{0,55}N /$ $Ti_{0,45}Al_{0,55}$, мкм	Относительная общая толщина слоев $Ti_{0,45}Al_{0,55}N$, %	Общая толщина покрытия, мкм
$Ti_{0,45}Al_{0,55}N$	1/-	3,0/0	100	3,0
ML1	4/3	0,5/0,3	69	2,9
ML2	11/10	0,21/0,07	77	3,0
ML3	4/3	0,6/0,2	80	3,0
ML4	4/3	0,3/0,6	40	3,0

Рентгеновский микроанализ покрытий показал, что соотношение Ti и Al во всех исследованных образцах составляет 45/55. Анализ картин рентгеновской дифракции выявил, что однослойное покрытие $Ti_{0,45}Al_{0,55}N$ имеет ГЦК структуру типа NaCl и соответствует кристаллической решетке TiN, в которой Al частично замещает Ti, то есть представляет собой твердый раствор $Ti_{0,45}Al_{0,55}N$. Аналогичные пики Ti-Al-N на дифрактограммах многослойных покрытий свидетельствуют об одинаковом фазовом составе их керамических слоев и однослойного покрытия. Единственной кристаллической фазой металлических слоев является γ -фаза алюминида титана с тетрагональной структурой.

Измерение механических характеристик покрытий методом наноиндентирования показало, что нанесение промежуточных металлических слоев $Ti_{0,45}Al_{0,55}$ приводит к существенному снижению твердости и эффективного модуля упругости покрытий уже при глубине проникновения индентора в образец, не превышающей толщину верхнего керамического слоя. При этом степень снижения механических характеристик покрытий

Секция 5. Деградация тонких пленок и многослойных покрытий как иерархически организованных структур

зависит как от относительной, так и от абсолютной толщины керамических и металлических слоев. Кроме того механические характеристики многослойных покрытий падают с увеличением глубины индентирования, что обусловлено растущим вкладом более мягких металлических слоев в механический отклик покрытия.

В результате проведенных исследований закономерностей механического поведения однослойных ($\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}\text{N}$) и многослойных ($\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}\text{N}/\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}$) покрытий на упруго-пластической стальной подложке при одноосном растяжении выявлен стадийный характер их разрушения, обусловленный последовательным развитием и конкуренцией между различными механизмами релаксации напряжений. Показано, что процесс разрушения покрытий состоит из четырех стадий, каждая из которых характеризуется различной скоростью роста плотности поперечных трещин. Установлено, что изменение архитектуры покрытий (их общей толщины и соотношения толщин металлических и керамических слоев) позволяет управлять характером развития конкурирующих механизмов их деформации и разрушения, обеспечивая повышение их надежности. Предложена методика количественной аттестации накопления повреждений в покрытиях в процессе растяжения, включающая в себя определение плотности распределения в них поперечных и перекрестных трещин, а также относительной площади скалывания.

Изучены закономерности деградации однослойных и многослойных покрытий в процессе изотермического отжига при температуре 900 °С. Установлено, что промежуточные слои $\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}$ оказывают существенное влияние на кинетику окисления и стойкость к окислению покрытий на основе системы Ti-Al-N. В однослойном покрытии с выраженной столбчатой зеренной структурой неплотные границы зерен способствуют интенсивной диффузии кислорода внутрь покрытия и ионов Al и Ti к его поверхности, приводя его быстрому окислению. В многослойных покрытиях $\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}\text{N}/\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}$ границы раздела между слоями препятствуют росту столбчатых зерен через всю толщину покрытия, существенно замедляя скорость диффузии. Кроме того, формирование плотного защитного слоя Al_2O_3 на поверхности металлических слоев $\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}$ значительно снижает скорость дальнейшего окисления покрытий, причем данный эффект усиливается с ростом толщины металлических слоев. Таким образом, наиболее высокую стойкость к окислению продемонстрировали покрытия $\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}\text{N}/\text{Ti}_{0,45}\text{Al}_{0,55}$ с соотношением толщин керамических и металлических слоев 1:2.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 гг. (направление III. 23.1.3).

DOI: 10.17223/9785946218412/302

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ Ta В ПОКРЫТИЯХ Ti-Al-Ta-N НА ИХ СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

¹Шугуров А.Р., ^{1,2}Кузьминов Е.Д., ¹Кастеров А.М., ^{1,3}Акулинкин А.А., ^{1,2}Панин А.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*НИИ Томский политехнический университет, Томск*

³*Томский научный центр СО РАН, Томск*

Покрытия на основе нитридов переходных металлов, в особенности системы Ti-Al-N, на сегодняшний день являются наиболее востребованными для защиты от износа и коррозии деталей и механизмов в обрабатывающей, авиакосмической, автомобильной, медицинской и других отраслях промышленности. Добавление Al в покрытия TiN позволило резко увеличить их стойкость к окислению (с 500 °С до 800 °С), а также обеспечить сохранение высоких значений твердости и износостойкости при повышенных температурах. Дальнейшие перспективы повышения надежности и долговечности покрытий на основе Ti-Al-N связаны с введением в их состав дополнительных элементов, то есть переход к системам, содержащим 4, 5 и более компонентов. В частности, легирование покрытий Ti-Al-N элементами IV и V групп (Zr, Hf, Nb и Ta) позволяет повысить их механические характеристики, износостойкость и термическую стабильность. Однако влияние легирующих добавок на характеристики подобных многокомпонентных покрытий в значительной степени определяется их относительным содержанием, что обуславливает необходимость поиска оптимального состава покрытий, обеспечивающего высокие значения прочности, вязкости разрушения, сопротивления образованию трещин и др. Цель данной работы – исследование влияния легирования Ta на структуру и механические свойства покрытий на основе Ti-Al-N, а также характер их деформации и разрушения при одноосном растяжении.

Осаждение покрытий выполняли методом реактивного магнетронного распыления на подложки из титанового сплава VT1-0 и Al₂O₃. Покрытия наносили с помощью двухмагнетронной распылительной системы, в которой использовались две мишени, состоящие из сплава Ti-Al (64 вес. % Ti и 36 вес. % Al) и Ta соответственно. Распыление проводили в среде из смеси газов аргона и азота при давлении 0,3 Па. Отношение парциального давления азота к общему давлению газовой смеси в рабочей камере поддерживали на уровне 0,23. Подложки подогревали до температуры 425 °С. Толщина покрытий составляла 3 мкм.

Методами атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопии исследовано влияние содержания Ta на морфологию поверхности и микроструктуру покрытий Ti-Al-Ta-N. Установлено, что независимо от концентрации Ta покрытия характеризуются мелкозернистой морфологией поверхности и столбчатой зеренной структурой. Методом рентгеновской дифракции в условиях симметричной съемки исследованы микроструктура и фазовый состав покрытий Ti-Al-Ta-N. Выявлено, что все исследованные покрытия имеют ГЦК структуру типа NaCl, в которой Al и Ta частично замещают Ti. При этом с увеличением концентрации Ta от 0 до 65 ат. % происходит линейный рост параметра решетки покрытий с 0,417 до 0,434 нм. Кроме того, с ростом содержания Ta наблюдается изменение текстуры покрытий от (111) в образцах, содержащих 10 ат. % Ta, к (200) у покрытий с 65 ат. % Ta.

Аттестация механических характеристик покрытий Ti-Al-Ta-N методом наноиндентирования показала, что введение Ta приводит к снижению их твердости и эффективного модуля упругости по сравнению с покрытием Ti-Al-N. При этом твердость покрытий H слабо зависит от содержания Ta, тогда как модуль упругости E^* монотонно снижается во всем исследованном диапазоне концентраций Ta. В результате зависимость отношения H/E^* от содержания Ta имеет максимум при 30-35 ат. %. На основе измерений кривизны прогиба подложки методом контактной профилометрии проведены расчеты остаточных внутренних напряжений в покрытиях с помощью формулы Стоуни. Показано, что введение Ta способствует росту сжимающих напряжений в покрытиях. При этом наиболее

Секция 5. Деградация тонких пленок и многослойных покрытий как иерархически организованных структур

сильные напряжения также развиваются в покрытиях с 30-35 ат. % Ta, где они достигают величины 3,9 ГПа.

Исследованы закономерности механического поведения покрытий Ti-Al-Ta-N на подложке Ti при одноосном растяжении. Показано, что деформация и разрушение покрытий происходит посредством последовательного развития и конкуренции между различными механизмами релаксации напряжений, которые включают в себя образование поперечных и диагональных трещин, а также изгиб и отслоение образовавшихся фрагментов покрытий. Установлено, что процесс разрушения покрытий состоит из нескольких стадий, каждая из которых характеризуется различной скоростью роста плотности распределения трещин. Определен диапазон концентраций Ta, в котором покрытия Ti-Al-Ta-N характеризуются наиболее высокой стойкостью к образованию трещин.

Таким образом, в результате проведенных исследований изучены закономерности изменения структуры и механических характеристик покрытий Ti-Al-Ta-N с увеличением в них содержания Ta, а также выработаны рекомендации по их оптимальному элементному составу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №18-19-00589).

DOI: 10.17223/9785946218412/303

ИМПЛАНТАЦИЯ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ ИОНАМИ АЛЮМИНИЯ, БОРА, КИСЛОРОДА И ЕЁ КОРРОЗИОННАЯ СТОЙКОСТЬ

Дорофеева Т.И., Губайдулина Т.А., Сергеев О.В., Сунгатулин А. Р., Сергеев В.П.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия
dorofeeva@ispms.tsc.ru

Защита металлических деталей машин и механизмов от коррозии осуществляется путём нанесения покрытий, получаемых, как правило, гальваническими методами. К ценным свойствам гальванического метода следует отнести возможность регулирования толщины покрытия, особенно в тонких слоях. Однако, процесс гальванического нанесения покрытия, а также предварительное травление стали в кислотах согласно ГОСТ 9.305-84, вызывает наводороживание металла. Для деталей прецизионной техники это недопустимо.

Одним из способов решения описанной проблемы может стать замена гальванических методов получения покрытий на современные вакуумные технологии. Эти технологии позволяют получить качественное защитное покрытие без пор и микротрещин за один технологический цикл.

В связи с этим, целью данной работы явилось получение специального покрытия на образцах стали 12Х18Н9Т-ВД с использованием методов вакуумной ионно-пучковой модификации поверхностного слоя.

Для модифицирования поверхностного слоя изделий и экспериментальных образцов использовалась вакуумная технологическая установка УВН-05МД «КВАНТ», на которой смонтированы ионные имплантеры: непрерывный источник газовых ионов с полым катодом «ДИОНИС-2» и вакуумно-дуговой импульсный источник ионных пучков «ДИАНА-3. Образец помещали в камеру на вращающийся стол, расположенный на одном из сателлитов планетарного механизма поворота, с помощью которого можно переводить его без развакуумирования в положение напротив любого из двух обрабатывающих устройств. Вакуум создавали в камере с помощью безмаслянных откачных средств (форвакуумный спиральный насос и высоковакуумный криогенный насос), обеспечивающих величину остаточного давления газов не более 6×10^{-4} Па. Образцы сначала подвергались одновременной имплантации ионами алюминия и бора с ускоряющим напряжением 80 кВ и флюенсом $1 \cdot 10^{17}$ ион/см² и затем имплантации ионами кислорода с ускоряющим напряжением 10 кВ и флюенсом $1 \cdot 10^{18}$ ион/см².

Определение величины шероховатости поверхностно-модифицированного слоя (ПМС) экспериментальных образцов проводили при помощи контактного профилографа Alpha-Step IQ Surface Profiler.

Изменение массы образцов после ионной обработки производили на фольгах размером $\varnothing 35 \times 0,2$ мм, изготовленных из материала экспериментальных образцов. Массу фольг до и после обработки измеряли на аналитических весах ВЛР-200.

Для испытаний образцов с поверхностно-модифицированным слоем на коррозионную стойкость использовался испытательный стенд. Испытательный стенд представляет собой камеру с автоматической подачей соляного тумана и автоматическим таймером. Образцы перед испытаниями обезжиривались органическими растворителями: бензином, спиртом этиловым, не оставляющими следов на поверхности полированных образцов.

Образцы исследовались методом ВИМС для определения концентрации алюминия, бора и кислорода в поверхностном слое. Предельная концентрация алюминия, бора и кислорода в образце 1, 5 и 0,3 ат. % соответственно. При этом, имплантация ионов кислорода привела к травлению поверхности модифицированного ионами алюминия и бора образца. Модифицированный ионами алюминия и бора поверхностный слой после имплантации ионов кислорода стравился на ~ 70 нм. При этом ионы кислорода, алюминия и бора оказались на глубине до ~ 9 нм, ~ 35 нм и ~ 60 нм соответственно.

Секция 5. Дegradaция тонких пленок и многослойных покрытий как иерархически организованных структур

Проведены измерения шероховатости экспериментальных образцов, после ионной обработки. Ионная обработка не приводит к ухудшению шероховатости поверхности экспериментальных образцов, а приводит к некоторому улучшению вследствие травления поверхностного слоя в результате высокоэнергетической ионной обработки. Таким образом, качество поверхности напрямую зависит от предварительной подготовки поверхности образцов перед ионной обработкой.

На рис. 1 приведено изменение массы образцов из стали 12Х18Н9Т-ВД в зависимости от времени при испытаниях на коррозионную стойкость.

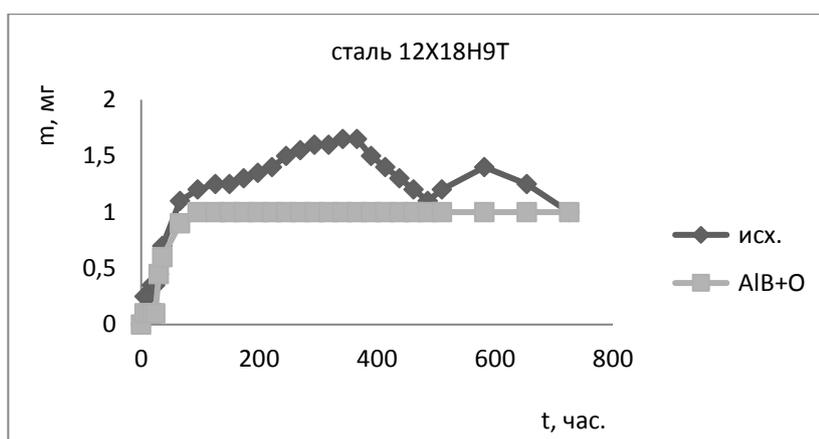


Рис.1. Изменение массы образцов из стали 12Х18Н9Т-ВД в зависимости от времени.

На исходных образцах из стали марки 12Х18Н9Т-ВД наблюдаемое изменение массы свидетельствует об образовании шпинельных соединений типа Fe_xCr_yO , характерных для хромистых сталей.

Изменение массы образцов, которые сначала подвергались одновременной имплантации ионами алюминия и бора с последующей имплантацией ионами кислорода O^{2-} прекратилось через 60 часов коррозионных испытаний.

Выводы

Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что при режиме ионно-пучкового пассивирования поверхности образцов из стали 12Х18Н9Т-ВД: имплантация ионов алюминия и бора с ускоряющим напряжением 80 кВ и флюенсом $1 \cdot 10^{17}$ ион/см² с последующей одновременной имплантацией ионов кислорода с ускоряющим напряжением 10 кВ и флюенсом $1 \cdot 10^{18}$ ион/см² предельная концентрация алюминия, бора и кислорода в образце 1, 5 и 0,3 ат. % соответственно

Установлено, что ионная обработка не приводит к ухудшению шероховатости поверхности экспериментальных образцов, а приводит к некоторому улучшению вследствие травления поверхностного слоя в результате энергетической ионной обработки.

Определено, что при ионной обработке образцов поверхностный слой образцов распыляется. Убыль массы стальных образцов составила $\sim 0,12$ мг/см².

Коррозионные испытания образцов показали, что через 60 часов на имплантированных образцах прекращается коррозионный процесс.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/304

ОСОБЕННОСТИ ДИФФУЗИИ В ПЕРЕХОДНОЙ ЗОНЕ «ПОКРЫТИЕ (Si,Ta) –
ПОДЛОЖКА (TiNi)» ПРИ ВНЕШНЕМ НАГРЕВЕ

^{1,2}Князева А.Г., ¹Крюкова О.Н., ¹Маслов А.Л.

¹ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²ФГАОУ ВО НИ «Томский политехнический университет», Томск

Сегодня в медицине для изготовления различных имплантантов широко применяются изделия из материалов с эффектом памяти формы, в том числе, из никелида титана – давно известного и хорошо изученного сплава, обладающего этим свойством [1]. Однако использование никелида титана в медицинских целях осложнено токсичностью никеля, считающегося канцерогеном и аллергеном [2]. Для решения этой проблемы на поверхности изделий формируют различные барьерные покрытия. К таким покрытиям предъявляется ряд требований: они должны обладать значительной адгезионной прочностью, быть стойкими к коррозии, не ухудшать полезные механические свойства изделий и при всем этом быть биосовместимыми.

Одним из перспективных методов получения таких покрытий является воздействие на специальную пленку, предварительно нанесенную на поверхность изделия, потоком электронов [3]. Для осаждения могут быть использованы различные элементы [4], в том числе, кремний и тантал. При этом в переходном слое между покрытием и подложкой формируется многокомпонентный и многофазный материал. Процесс образования и структуру переходной зоны достаточно сложно изучать и интерпретировать. Важную роль в таких исследованиях может играть математическое моделирование.

В настоящей работе проанализирована особенность формирования переходных слоев между покрытиями из кремния и тантала и подложкой из TiNi в окрестности границ разделяющих зерна, которые образуют подложку. Зерна и границы рассматриваются при этом как отдельные фазы с разными диффузионными свойствами. В случае микрозерен размер граничной фазы мал по сравнению с размером объемной фазы. В случае нанозерен размеры фаз сопоставимы, с чем связаны особенности формирования состава переходной зоны.

Для описания процесса формирования переходной зоны рассматривается часть образца, включающая половины трех зерен и границы между ними. Межзеренная граница охарактеризована коэффициентом диффузии, превышающим коэффициент диффузии в самом зерне.

Было принято, что влияние на образец падающего потока электронов сводится к его нагреву. При этом считалось, что нагрев осуществляется таким образом, что температура одинакова во всем изделии. Такому приближению соответствует значительно большее значение коэффициента температуропроводности для твердых тел по сравнению с коэффициентом диффузии.

Эти соображения позволяют определять динамику температуры из уравнения теплового баланса, включающего источники, связанные с внешним нагревом и тепловыми эффектами химических реакций. Диффузия кремния и тантала описывается двумерными уравнениями диффузии. Эволюция концентраций неподвижных продуктов химических реакций описывается уравнениями химической кинетики.

Задача сформулирована в безразмерном виде, и решена численно, с использованием неявных конечно-разностных схем. Было показано, что в зависимости от интенсивности межзеренной диффузии (которая зависит от предварительной обработки и способа получения никелида титана) возможно формирование различной фазовой структуры вблизи покрытия и границ зерен.

1. Kauffman G.B., May I. The Story of Nitinol: The Serendipitous Discovery of the Memory Metal and its Application // Chemical Educator. 1997. Vol. 2. P. 1-21.
2. Es-Souni M., Es-Souni M., Fischer-Brandies H. Assessing the biocompatibility of NiTi shape memory alloys used for medical application // Analytical and bioanalytical chemistry. 2005. Vol. 381(3). P. 557-567.
3. Boiko V.I., Valyaev A.N., Pogrebnyak A.D. Metal modification by high-power pulsed particle beams // Physics-Uspekhi. 1999. Vol. 42. P. 1139–1166.
4. Lotkov A.I., Meisner L.L., Matveeva V.A., et al. Effect of silicon, titanium, and zirconium ion implantation on NiTi biocompatibility. Special issue on «Modification, synthesis, and analysis of advanced materials using ion beam techniques» // Advances in Materials Science and Engineering. 2012. Vol. 2012. 16 p.

DOI: 10.17223/9785946218412/305

**НАНОКОМПОЗИТНЫЕ Ti-Ni-Nb И Ti-Ni-Ta ПОВЕРХНОСТНЫЕ СПЛАВЫ:
МОДЕЛИРОВАНИЕ, АДДИТИВНЫЙ ТОНКОПЛЕНОЧНЫЙ ЭЛЕКТРОННО-
ПУЧКОВЫЙ СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКА МИКРОСТРУКТУРЫ**

^{1,2}Мейснер Л.Л.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск*

В настоящее время существует актуальная потребность в легко интегрируемых и миниатюризуемых материалах, способных совершать механическую работу, обратимо деформироваться с максимально долгим сохранением эксплуатационных характеристик. Для этих целей лучшим выбором являются TiNi сплавы с эффектами памяти формы и сверхэластичности (ЭПФ-СЭ) в виде низкоразмерных изделий (проволока, листовой прокат и пр. субмикронной толщины). Соотношение приповерхностного объема, подвергаемого наибольшей деформации и опасности разрушения, и внутреннего объема, обеспечивающего эксплуатационные характеристики материала, в этих случаях становятся соизмеримыми. В этой связи проблемой является создание тонкого (толщиной до нескольких микрометров) функционального поверхностного слоя, обеспечивающего высокие усталостные характеристики в интервале значительных циклических нагрузок (~10 %).

В последнюю декаду набирают темп исследования, связанные с разработкой и использованием тонкопленочных аморфных/наноккомпозитных покрытий, чаще всего полученных магнетронным методом, для повышения поверхностно-чувствительных свойств и, прежде всего, усталостных характеристик конструкционных сплавов (сплав Ti-6Al-4V и др.). Последнее связано с тем, что развитие полос локализованного сдвига в подложке и зарождение усталостных трещин на ее поверхности тормозятся за счет однородного пластического течения тонкой аморфной пленки. Ключевым фактором, определяющим усталостное поведение подобных систем, является адгезия пленки к подложке: чем выше адгезия, тем выше их усталостная долговечность.

Проблема адгезии функциональных тонкопленочных покрытий, ограничивающая их потенциальные применения, может быть решена путем формирования на металлических подложках тонких (≤ 1 мкм) поверхностных сплавов (ПС) с наноккомпозитной структурой.

В докладе обсуждаются результаты: (1) термодинамического моделирования и тепловых расчетов, использованных для выбора составов сплавов на основе Ti-Ni-Nb и Ti-Ni-Ta с заданным типом атомного структурного состояния (аморфное, аморфно-нанокристаллическое (наноккомпозитное), нанокристаллическое) и режимов их синтеза на подложках из TiNi сплава; (2) экспериментального исследования микроструктуры поверхностных Ti-Ni-Nb и Ti-Ni-Ta сплавов; (3) исследования физико-механических и биохимических свойств образцов с поверхностными сплавами. Показано, что эти поверхностные сплавы, толщиной 1-2 мкм, сформированные путем 10-30 кратного повторения отдельного цикла синтеза – осаждения пленок Ti-Nb/Ti-Ta толщиной 50-100 нм на TiNi подложку и с последующим 5-кратным электронно-пучковым плавлением и перемешиванием с TiNi подложкой, имеют, многослойную аморфно-наноккомпозитную структуру с градиентно изменяющимся химическим составом. Переходная зона между поверхностными сплавами и подложкой толщиной ~1 мкм, характеризуется монотонным по глубине замещением ниобия или тантала никелем и диффузионным переходом к подложке из никелида титана, обеспечивая высокую адгезию поверхностного сплава с подложкой.

Разработка способа электронно-пучкового синтеза и исследования структуры поверхностных сплавов выполнены при финансовой поддержке проектом РФФИ №18-19-00198 (26.04.2018). Исследования физико-механических и биохимических свойств образцов выполнены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, проект III.23.2.1.

DOI: 10.17223/9785946218412/306

**ИЗНАШИВАНИЕ МАГНЕТРОННЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ
СИСТЕМЫ Cu–Mo–S В УСЛОВИЯХ ПРИЛОЖЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА**

¹Жарков С.Ю., ^{1,2}Сергеев В.П., ^{1,2}Калашников М.П.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия,*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Россия*

retc@ispms.tsc.ru

Поиск методов повышения срока эксплуатации электроконтактных пар трения, принимающих слабые электромагнитные сигналы в условиях непрерывного вращения, для перспективных космических аппаратов на сегодняшний день является актуальной задачей. Твердосмазочные покрытия на основе дихалькогенидов широко используются в качестве антифрикционных систем в различных отраслях. Этому способствует низкий коэффициент трения (аномально низкий в условиях вакуума), достаточно высокая термическая стабильность и хорошая воспроизводимость. Однако, использование покрытий из чистого дисульфида молибдена в качестве смазки электроконтактных пар трения проблематично из-за его относительно низкой электропроводности. Одним из возможных путей решения этой задачи представляется осаждение композитных покрытий на основе системы Cu–Mo–S, обладающих низким коэффициентом трения и высокой электропроводностью. Целью работы является изучение триботехнических свойств нанокompозитных покрытий на основе Cu–Mo–S в условиях трения в атмосфере аргона с приложением электрического тока малой плотности.

Испытания на износ нанокompозитных покрытий на основе системы Cu–Mo–S в среде аргона в специальной малогабаритной машине трения с малыми нагрузками в паре с медным контртелом показали, что приложение переменного тока малой плотности (0,05 мА/см²), характерного для информационных сигналов в сканерах-зондировщиках спутников дистанционного зондирования Земли, не приводит к существенной разнице в характере трения исследуемых покрытий. Приложение тока с выбранными параметрами в зону трения не приводит к возникновению поверхностной эрозии, что подтверждается проведенными исследованиями морфологии следа износа с помощью растрового электронного микроскопа. Полученная кривая изнашивания медного образца с покрытием Cu–Mo–S при трении в паре с медным контртелом в атмосфере аргона в условиях приложения тока малой плотности характерна для усталостного изнашивания.

Таким образом, установлено, что приложение переменного электрического тока плотностью 0,05 мА/см² через контакт «медный образец с покрытием Cu–Mo–S – медное контртело» не вызывает появление поверхностной эрозии на поверхности образца и не влияет на процесс изнашивания таких покрытий.

DOI: 10.17223/9785946218412/307

**КИНЕТИКА ТЕРМООКСИЛИТЕЛЬНОЙ ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ СМЕСЕЙ
НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА**

^{1,3}Подзорова М.В., ^{2,3}Тертышная Ю.В., ^{1,2}Попов А.А.

¹Российский экономический университет имени Г.В. Плеханова, Москва, Россия

²Институт биохимической физики имени Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

³ Федеральний научный агроинженерный центр ВИМ, Москва, Россия
mariapdz@mail.ru

Термоокисление - один из наиболее распространенных и важных процессов, в котором участвуют полимерные материалы. Этот процесс сопровождается получением и переработку полимеров и полимерных композиций, эксплуатацию изделий из них и обычно приводит к ухудшению свойств материала. Процессы термоокисления полимеров и в особенности смесей полимеров очень сложны по химической природе и изучаются не один десяток лет. Кинетика процесса окисления в таких системах может сильно отличаться по составу.

В данной работе исследовалось термическое окисление бинарных смесей на основе полилактида и полиэтилена низкой плотности с добавлением состаренного полиэтилена как аналога вторсырья при разных температурах (80, 90, 110 °С).

Для получения композиций были использованы ПЭНП марки 15803 – 020 (Россия), ПЛА марки 4032D производства компании Nature works (США) и состаренный ПЭНП (ПЭНП_с) в количестве 10, 20, 30 мас. % (Т = 90 °С, время окисления 250 часов). Содержание ПЛА в смеси было следующим: 20, 30, 50, 70, 80, 100 мас. %.

Для оценки теплофизических характеристик полученных образцов, а также анализа композиций после термоокисления, был использован метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), исследован процесс термоокисления образцов при разной температуре.

На манометрической установке в процессе исследования кинетики термического окисления полимеров при 80, 90, 110 °С и давлении кислорода 300 мм рт ст было выявлено, что ПЛА имеет низкую степень поглощения кислорода по сравнению с чистым ПЭНП. Введение в композицию ПЭНП_с ускоряет процесс термоокисления при всех исследуемых температурах.

Для количественной оценки процесса термического окисления была рассчитана энергия активации (E_a). Энергия активации чистых полимеров составляет для ПЛА - 130 кДж/моль, ПЭНП – 112 кДж/моль, ПЭНП_с – 75,5 кДж/моль. В композициях ПЛА:ПЭНП значение E_a меняется в зависимости от содержания ПЛА в смеси, так для композиции с 70 мас. % ПЛА $E_a = 75,7$ кДж/моль, а для смеси 50:50 $E_a = 52,5$ кДж/моль. Видно, что по сравнению с чистыми полимерами E_a композиций ниже, что свидетельствует о более быстром процессе начала окисления.

Для изучения процессов фазовых переходов в исследуемых смесях при термоокислении, методом дифференциальной сканирующей калориметрии были получены термограммы плавления до и после процесса термоокисления при данных температурах в течение 25 часов.

При 110 °С повышается пик стеклования ПЛА с 58 до 65 °С, а при 80 °С – до 71 °С и исчезает пик кристаллизации в области 96-98 °С. Температура плавления увеличивается, но не так значительно, как T_c , всего на 3 °С.

В композициях отмечается исчезновение пика стеклования и кристаллизации ПЛА, температура плавления ПЛА и ПЭНП увеличивается на 3-4 °С. Что касается чистого ПЭНП и ПЭНП_с, то их $T_{пл}$ практически не меняется, однако форма пика указывает на возможное появление дефектов в кристаллитах и изменения в структуре по сравнению с исходным образцом.

Таким образом при изучении термоокисления установлено, что процесс поглощения кислорода зависит от состава смеси, т.е. от содержания компонента с высокой степенью кристалличности – ПЛА.

DOI: 10.17223/9785946218412/308

ВЛИЯНИЕ ТЕРМООКИСЛЕНИЯ НА БИОДЕГРАДАЦИЮ ИЗОТАКТИЧЕСКОГО ПОЛИПРОПИЛЕНА, ПОЛИАМИДА 6/66-4 И СМЕСЕЙ НА ИХ ОСНОВЕ.

^{1,2}Воронцов Н.В., ²Марголин А.Л., ^{1,2}Попов А.А.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Россия

²Российский экономический университет им. Г.В. Плеханова, Москва, Россия

Одним из наиболее эффективных способов решения проблемы полимерного мусора является производство биоразлагаемых полимеров, которые способны деградировать под действием естественных факторов окружающей среды.

Известно из литературы, что разрушение полиолефинов, к которым относится и полипропилен, длится более 400 лет. В то же время показано, что полиамид способен деградировать значительно быстрее, а при его окислении срок его разложения сопоставим с биополимерами натурального происхождения.

Для придания полипропилену биоразлагаемых свойств мы вводили в него полиамид путем смешивания. Объектами исследования являлись плёночные образцы на основе изотактического полипропилена (ПП, марка 01030 Каплен (ТУ 2211-015-00203521) ОАО «Газпромнефть-Московский НПЗ») с 5, 10, 20, 30, 40, 50 мас.% полиамида 6/66-4 (ПА, марка 6/66-4, ООО «Анид», г. Екатеринбург). Компаундирование полимеров осуществлялось на смесителе типа Брабендер (ИХФ РАН, Россия) при $190 \pm 2^\circ\text{C}$ в атмосфере аргона с последующим прессованием (толщина пленок около 100-150 мкм). Термоокисление проводили в термостате при $140 \pm 2^\circ\text{C}$ в течение 31 часа. Влияние биодegradaции на образцы проводили в открытом грунте (ГОСТ 9.060-75) в течение 4 месяцев. Теплофизические свойства анализировали на оборудовании Netzsch DSC 214 Polyma, структуру пленок до и после термоокисления анализировали с помощью ИК-спектроскопии на приборе Perkin Elmer. С помощью оптического микроскопа Zeiss исследовали образцы на видимые внешние изменения и рост мицелия.

Показано, что наибольшей деструкции с обильным обрастанием гифами микромицетов подверглись пленки с содержанием 30-50% масс. ПА, как предокисленные, так и неокисленные. Особенные изменения видны на образцах, которые были предварительно окислены. Так же изменения в ходе биодegradaции смесей обнаружены с помощью ДСК: значительные изменения энтальпий плавления и кристаллизации, увеличение температур кристаллизации. На ИК-спектрах предварительно окисленных образцов после грунта заметно уменьшение полос в области поглощения амидных, карбонильных и аминогрупп.

Полученные результаты показывают, что исследованный ПА можно использовать в качестве биоразлагаемой добавки для ускорения биодegradaции материалов.

DOI: 10.17223/9785946218412/309

**СОСТАВ И СТРУКТУРА ГРАДИЕНТНО-СЛОИСТЫХ ПОКРЫТИЙ:
ЛЕГИРОВАННЫЙ НИТРИД ТИТАНА - ДИСПЕРСНО-УПРОЧНЁННЫЙ
АМОРФНЫЙ УГЛЕРОД**

¹Овчинников С.В., ¹Слабодчиков В.А., ^{1,2}Кузнецов В.М.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

²Томский государственный университет

Перспективным направлением синтеза износостойких покрытий является формирование градиентно-слоистых композиций, обеспечивающих долговечность покрытия ввиду снижения контактных напряжений, высоких адгезионной прочности, несущей способности нагрузки и вязкости разрушения. Данные характеристики покрытий могут быть получены за счёт соответствующего конструирования их состава и структуры. В этой связи в исследуемом в данной работе покрытиях системы элементов Ti-Al-Si-Cu-N-C предполагается оптимизация их состава и структуры с формированием твёрдого (несущего нагрузку) слоя легированного нитрида (Ti,Al,Si,Cu)N, верхнего антифрикционного слоя аморфной углеродной матрицы с высокодисперсными частицами TiC (повышают вязкость разрушения) и слоя переходного состава между ними.

Указанные покрытия получены на установке СПРУТ [1] несбалансированным магнетронным распылением мишеней титана (BT 1-0), сплава Al₄₀Si₂₀Cu₂₀Ti₁₀ и графитовых мишеней технической чистоты при ассистировании плазмогенератора ПИНК, потенциале смещения -100 В на подложках 12X18H10T, P6M5, α-Ti и сплава T15K6. Для создания переходного слоя ступенчато изменяли мощность распыления мишени сплава AlSiCuTi вплоть до нулевого значения, тогда как состав и структуру основных слоёв контролировали соотношением мощностей распыления всех отмеченных мишеней.

На основе представленных условий синтеза получено многослойное и градиентное по составу покрытие (рис. 1) общей толщиной около 1.15 мкм с верхним тонким слоем чистого аморфного углерода (предназначен для уменьшения износа при приработке).

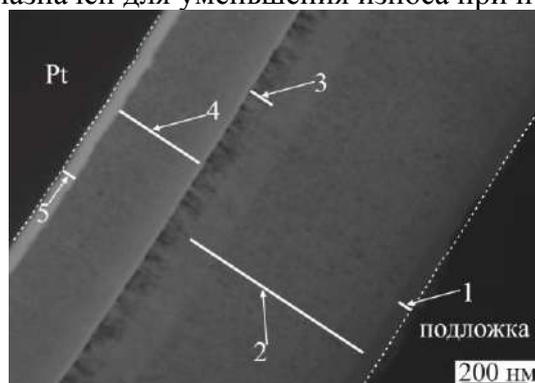


Рис. 1. Светлопольное изображение структуры градиентно-слоистого покрытия в поперечном сечении; обозначено: 1 – подслоя α-Ti, 2 – слой (Ti,Al,Si,Cu)N постоянного состава, 3 – слой (Ti,Al,Si,Cu)N переменного состава. 4 – слой TiC/a-C, 5 – слой a-C.

Для твёрдого несущего нагрузку слоя (Ti,Al,Si,Cu)N установлено следующее. Во-первых, согласно известным представлениям закономерностей формирования структуры элементный состав данного слоя (сверхстехиометричное относительно структуры В1 содержание азота, высокая – до 25 ат.% - концентрация Al при более низких, на порядок, концентрациях меди и кремния) обеспечивает как повышение твёрдости за счёт твердорастворного упрочнения и диспергирования структуры, так и повышение пластичности покрытия при выделении нитрида алюминия гексагональной модификации.

Во-вторых, неоднородность фазового состава и параметров решёток фаз по толщине, которое при близости элементного состава свидетельствует об изменении упруго-напряжённого состояния кристаллов. В-третьих, неоднородности структурного состояния на различных масштабных уровнях, связанные с формированием наноразмерной слоевой

Секция 5. Деградация тонких пленок и многослойных покрытий как иерархически организованных структур

структуры, различием размеров кристаллов (наличие текстурной компоненты роста), повышением дисперсности кристаллов в верхней части слоя и ростом столбчатых кристаллов в слое с пониженным содержанием легирующих элементов.

Для слоя покрытия TiC/a-C найдены рост концентрации углерода и уменьшение размеров кристаллов TiC при уменьшении мощности распыления мишени титана с формированием структуры наноразмерных частиц (средний размер около 3 нм) карбида титана при толщине зернограничной прослойки a-C ~ 1 нм (оценка). Полученные результаты структурных исследований обсуждаются на основе учёта изменений в процессе синтеза условий получения: мощности распыления мишеней, температуры, интенсивности ассистирования плазмогенератором, планетарного вращения подложек.

1. Борисов Д.П., Дегистов К.Н., Коротаяев А.Д., Кузнецов В.М., Мошков В.Ю., Пинжин Ю.П., Тюменцев А.Н. Вакуумно-плазменный технологический комплекс «Спрут» для создания новых нанокompозитных материалов и упрочняющих поверхностных структур изделий // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2010. Т. 76, № 12. С. 32 – 36.

Секция 6. Методы и средства неразрушающего
контроля материалов и конструкций с
иерархической структурой

DOI: 10.17223/9785946218412/310

**РЕНТГЕНОВСКИЙ МЕТОД КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ ВЕЛИЧИНЫ МОДУЛЯ
УПРУГОСТИ В МАТЕРИАЛАХ С ГРАДИЕНТНЫМ ИЗМЕНЕНИЕМ ПАРАМЕТРОВ
СТРУКТУРЫ**

¹Остапенко М.Г., ^{1,2}Мейснер Л.Л.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

Результаты исследований, связанные с оценкой и сравнением величин остаточных упругих напряжений, полученных для одних и тех же материалов структурными (рентгеновская дифрактометрия) и механическими методами, показывают, что эти значения коррелируют между собой [1]. Наиболее близкие значения этих напряжений получаются тогда, когда в рентгеновских расчетах учитывается тензорный характер упругих свойств и ориентация плоскости отражения относительно нормали к плоскости поверхности. В то же время возникает вопрос, какие значения упругих констант наиболее приемлемы для определения напряжений рентгеновскими методами. Особенно сложно ответить на эти вопросы в тех случаях, когда внешние воздействия приводят к градиентному изменению химического состава и микроструктуры материала.

Цель данной работы – разработать методический подход с использованием рентгеновских методов для количественной оценки величины модуля упругости в материалах с градиентным изменением параметров структуры и сопоставить полученные результаты с данными по наноиндентированию.

В основу разрабатываемого метода оценки модуля упругости в материалах с градиентным изменением параметров структуры легли рассуждения, что каждый кристаллит ведет себя так, как если бы он был деформирован независимо от своих соседей. Тогда, для оценки модуля упругости $E(hkl, \psi)$ можно воспользоваться известным [2,3,4] выражением:

$$E_{\psi}^{hkl} = \frac{1}{F^{hkl}} \quad (1),$$

где F^{hkl} – фактор упругих напряжений, угол ψ – угол между направлением падающего рентгеновского луча с перпендикуляром к поверхности образца [2]. В предположении изотропности механических свойств для кристаллов с кубической структурой F^{hkl} имеет вид:

$$F^{hkl} = (2S_1^{hkl} + \frac{1}{2}S_2^{hkl} \sin^2 \psi) \quad (2).$$

Здесь S_1^{hkl} и S_2^{hkl} – константы упругости, которые в случае кубической сингонии кристаллической решетки связаны с коэффициентами упругости s_{ij} , определяющими «податливость» материала. Матрица S_{ij} коэффициентов упругости s_{ij} является обратной к матрице C_{ij} модулей упругости c_{ij} [5]. Таким образом, зная константы c_{ij} можно оценить величину упругих напряжений с учетом градиентного изменения модуля упругости E_{ψ}^{hkl} и экспериментально полученной зависимости ε_{ψ}^{hkl} .

Данный подход был использован при расчете модуля упругости для образцов никелида титана после импульсной электронно-пучковой обработки с плотностью энергии в пучке 20 Дж/см² и длительностью одного импульса $\tau=150$ мкс. Выявлено, что при увеличении толщины слоя h значение $E(hkl, \psi)$, рассчитанное с учетом угла скольжения ψ для рефлекса (110) фазы В2 никелида титана, уменьшается от значений ~115 МПа до ~94 МПа. Проведено сравнение значений модуля упругости E_n , полученных на этих же образцах методом наноиндентирования. Показано, что значения $E(hkl, \psi)$ и E_n близки, и имеют одинаковый характер изменения при увеличении толщины анализируемого слоя. Так, при увеличении толщины слоя h значение E_n уменьшается от значений ~95 МПа до ~60 МПа.

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

Таким образом, в данной работе представлен подход, демонстрирующий возможности эффективного использования рентгеновских методов для количественной оценки величины упругих модулей в материалах с градиентным изменением структуры. Кроме того, выявлено, что близки не только сравниваемые значения $E(hkl, \psi)$ и E_n , но и характер их изменения при увеличении толщины анализируемого слоя. С точки зрения практического приложения, применение упругих постоянных, полученных методом наноиндентирования, обеспечивает достоверный результат оценки уровня остаточных упругих напряжений методом рентгеновской дифракции, согласующийся с известными литературными данными [6-8].

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, госзадание (проект) № III.23.2.1.

1. Васильев Д.М., Смирнов Б.И. Некоторые рентгенографические методы изучения пластически деформированных металлов // Успехи физических наук. 1961. Т. LXXII. В.3. С. 503-558.
2. Тейлор А. Рентгеновская металлография. М.: Металлургия, 1965. 663 с.
3. Ch. Genzel, Advances in X-ray analysis (CD-ROM). 44 (2001) 247–256.
4. U. Welzel, J. Ligot, P. Lamparter, A.C. Vermeulen, E.J. Mittemeijer, Applied Crystallography 38 (2005) 1–29.
5. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель; под ред. А.А. Гусева. 4-е изд. М.: Наука, 1978. – 792 с.
6. K.M. Zhang, J.X. Zou, T. Grosdidier, N. Gey, S. Weber, D.Z. Yang, C. Dong, Mechanisms of structural evolutions associated with the high current pulsed electron beam treatment of a NiTi shape memory alloy, J. Vac. Sci. Technol. A: Vac. Surf. Films 25 (1) (2007) 28–36, <https://doi.org/10.1116/1.2388951>.
7. J.X. Zou, T. Grosdidier, K.M. Zhang, C. Dong, S. Weber, Mechanism of surface modifications on a NiTi alloy treated with low energy high current pulsed electron beam, Eur. Phys. J. Appl. Phys. 43 (3) (2008) 327–331, <https://doi.org/10.1051/epjap:2008072>.
8. Мейснер Л.Л., Лотков А.А., Остапенко М.Г., Гудимова Е.Ю. Анализ методами рентгеновской дифрактометрии градиента внутренних напряжений в никелиде титана после электронно-пучковой обработки поверхности // Физ. мезомех. –2012.–Т.15.–№3.–С.79–90.

DOI: 10.17223/9785946218412/311

**ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ДВУХФАЗНОЙ СИСТЕМЫ Pb – Sn НА АКУСТИЧЕСКУЮ
ЭМИССИЮ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ**

¹Салита Д.С., ^{1,2}Поляков В.В.

¹*Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия,*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

pvv@asu.ru

Исследование металлических сплавов с концентрациями компонентов, близкими к значениям, соответствующим точке эвтектики, представляет существенный теоретический и практический интерес. Физические механизмы пластической деформации и разрушения таких материалов, характеризующихся специфической микроструктурой [1], исследованы явно недостаточно. При деформировании металлических сплавов происходит локальная перестройка структуры, которая может сопровождаться акустической эмиссией. Регистрируемые характеристики этой эмиссии отражают особенности физических механизмов протекающих деформационных процессов [2]. Удобным объектом для изучения акустической эмиссии в эвтектоидных сплавах является двухфазная система Pb–Sn, отличающаяся низкой температурой плавления и достаточно стабильной микроструктурой [3]. В настоящей работе изучены закономерности изменения акустической эмиссии при пластической деформации системы Pb-Sn с концентрациями компонентов, отвечающими сплавам доэвтектоидного, эвтектоидного и заэвтектоидного состава.

Образцы для исследований изготавливались из расплавов с различным содержанием компонентов. Состав механической смеси свинца и олова при изготовлении подбирался таким образом, чтобы получить образцы в доэвтектоидном (50 вес.% Pb – 50 вес.% Sn), эвтектоидном (38,1 вес.% Pb – 61,9 вес.% Sn) и заэвтектоидном (30 вес.% Pb – 70 вес.% Sn) состояниях. Микроструктура материала контролировалась на оптическом и сканирующем электронном микроскопах.

Нагружение осуществлялось по схеме статического растяжения с постоянной скоростью деформирования. По экспериментальным данным строилась кривая деформационного упрочнения σ - ϵ , использовавшаяся для анализа стадийности пластической деформации и сопоставления с акустико-эмиссионными измерениями. В качестве регистрируемых характеристик акустической эмиссии применялись среднеквадратичные значения U , определявшиеся по методике [4] и представлявшиеся в виде зависимостей U от степени деформации ϵ .

Полученные экспериментальные данные свидетельствовали о существенном изменении вида сигналов акустической эмиссии при изменении концентраций компонентов системы. Именно, доэвтектоидный сплав характеризовался отчетливым максимумом акустического излучения на стадии деформационного упрочнения и практически отсутствием эмиссии на стадии разупрочнения с незначительным излучением при разрушении образца. Относительно невысокие значения U могут быть связаны с особенностями структуры, представлявшей из себя области с эвтектоидным строением в виде зерен из чередующихся прослоек свинца и олова с включениями областей из зерен α -фазы.

При переходе к эвтектоидному сплаву наблюдалось снижение акустической эмиссии на стадии пластической деформации с одновременным ее ростом при разрушении. По-видимому, это обусловлено влиянием многочисленных границ раздела между слоями компонентов, тормозящими движение потоков дефектов и снижающими релаксацию упругих напряжений за счет акустического излучения.

Для концентраций компонентов, соответствующих заэвтектоидному строению, был выявлен резкий рост акустической эмиссии, при этом мощные максимумы излучения охватывали как стадию упрочнения, так и начальный участок стадии разупрочнения. Выявленный значительный рост акустической эмиссии может быть связан с появившимся

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

вкладом в излучение от зерен β -фазы, сформировавшихся на границах областей с эвтектоидным строением.

Полученные результаты могут быть использованы при исследовании физических механизмов пластической деформации в двухфазных металлических системах с эвтектоидной структурой.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №17-08-00914.

1. Binary Alloy Phase Diagrams. 2nd ed. (T.B. Massalski, Editor-in-Chief; H. Okamoto, P.R. Subramanian, L. Kacprzak, Editors). ASM International, Materials Park, Ohio, USA. 1990. Vol 3.
2. Лепендин А.А., Поляков В.В. Скейлинг характеристик акустической эмиссии при пластической деформации и разрушении». Журнал технической физики. 2014. Т. 84. №7. С. 96-100.
3. Елсукова Т.Ф., Новоселова Е.М., Караваева В.В., Ангелова Г.В. Стадии высокотемпературной ползучести поликристаллов свинца как эволюция структурных уровней пластической деформации. Физическая мезомеханика. 2000. Т.3. С.91-99.
4. Salita D.S., Polyakov V.V. Application of acoustic emission for monitoring of deformation behavior of lead. AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 2051. Pp. 020263-1 – 020263-4. doi.org/10.1063/1.5083506

DOI: 10.17223/9785946218412/312

**ОСОБЕННОСТИ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ
ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИИ ТИТАНА**

¹Дмитриев А.А., ^{1,2}Поляков В.В.

¹*Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия,*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

pvv@asu.ru

Деформационное поведение материалов на основе титана с различной структурой в связи с их широким практическим использованием изучалось достаточно подробно. В ряде работ была описана акустическая эмиссия, регистрировавшаяся при пластической деформации и разрушении титана и отражавшая протекавшие в материале процессы перестройки структуры. В то же время результаты акустико-эмиссионных исследований заметно различаются, а физическая интерпретация получаемых данных противоречива [1-3]. В настоящей работе для исследования и интерпретации особенностей акустической эмиссии в титане привлекается разработанный авторами подход, основанный на применении в качестве признаков, характеризующих регистрируемые сигналы, коэффициентов многоуровневых дискретных вейвлет-преобразований [4]. Получаемые признаки далее подвергаются кластеризации с помощью математических методов многомерного анализа данных [5].

В качестве материала для исследований использовались образцы технически чистого титана ВТ1-0 в исходном и отожженном состояниях. Образцы имели стандартную форму для испытаний на статическое растяжение с размерами рабочей части 5x15x50 мм. Структура образцов контролировалась с помощью оптической микроскопии, средний размер зерен составлял 15-20 мкм у исходного материала и 50-70 мкм после отжига. На шлифе образцов отчетливо фиксировались достаточно крупные двойники.

При растяжении на испытательной машине регистрировались приложенная нагрузка и абсолютное удлинение, по которым рассчитывались истинное напряжение σ , истинная (логарифмическая) деформация ϵ , коэффициент деформационного упрочнения K и выделялись стадии деформационного упрочнения. Наряду с механическими характеристиками регистрировались сигналы акустической эмиссии, представленные в виде зависимостей среднеквадратичных значений напряжения U от деформации ϵ .

Для образцов титана в исходном состоянии были выделены три стадии, различавшиеся поведением коэффициента деформационного упрочнения. Было выявлено существенное различие вида сигнала акустической эмиссии для отдельных стадий. Именно, на первой стадии (стадии линейного упрочнения) происходило формирование мощного пика акустической эмиссии. Начальный участок второй стадии, описывавшей пластическое течение, также сопровождался появлением широкого максимума на регистрировавшемся акустико-эмиссионном сигнале. На третьей стадии возникали высокоамплитудные осцилляции, приводившие к формированию максимума акустической эмиссии непосредственно перед разрушением.

Образцы титана, подвергнутые отжигу, характеризовались аналогичной трехстадийной кривой деформационного упрочнения. В то же время вид сигнала акустической эмиссии существенно отличался. Первый максимум представлял из себя сильные осцилляции акустической эмиссии, охватывавшие весь участок линейного упрочнения и смещавшиеся на вторую стадию. При переходе к третьей стадии отчетливо наблюдался широкий второй максимум. На участках предразрушения и разрушения акустическое излучение практически не фиксировалось.

Первый максимум акустической эмиссии в исходном и отожженном образцах может быть связан с движением дислокационных потоков. Более широкий интервал деформаций, охваченный осцилляциями акустико-эмиссионного сигнала в отожженном состоянии, может быть вызван тем, что больший размер зерен сопровождался формированием более мощных

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

дислокационные потоков, выходящих на границы раздела в условиях монотонного развития деформации.

Второй максимум акустической эмиссии для исходных образцов, по-видимому, могли вызывать двойники. В этом случае всплески акустико-эмиссионных сигналов отражали релаксацию упругих напряжений, обусловленных динамикой формирования и развития этих дефектов. Третий максимум для титана в исходном состоянии может быть связан с процессами образования системы микротрещин, скачки которых сопровождалась акустическим излучением и быстро приводили к разрушению образца.

В то же время интерпретация второго максимума для отожженных образцов достаточно затруднительна. В связи с этим рассчитанные признаки акустико-эмиссионных сигналов (коэффициенты соответствующих вейвлет-преобразований), формировавших этот максимум, были сопоставлены с аналогичными признаками для сигналов, формировавших максимумы в исходном титане. Полученные значения признаков отражали энергетические и частотные особенности акустического излучения на участках кривой деформационного упрочнения, приходившихся на исследуемые максимумы акустической эмиссии. Полученные данные были подвергнуты кластеризации с помощью метода главных компонент. Результаты расчетов показали, что кластеры, описывавшие анализируемый максимум в отожженном титане и второй максимум для материала в исходном состоянии, очень близки. Это позволяет связать исследуемый максимум акустической эмиссии с двойниковыми процессами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №17-08-00914.

1. Стоев П.И., Папилов И.И. Акустическая эмиссия титана в процессе деформации. Вопросы атомной науки и техники. Серия: вакуум, чистые материалы, сверхпроводники. 2007. №4 С. 174 – 191.
2. Камышанченко Н.В., Никулин И.С., Кунгурцев Е.С., Кунгурцев М.С. Экспериментальное определение преимущественных механизмов релаксации напряжений при деформации металлов с гексагональной плотноупакованной решеткой. Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. Вып. 10. С. 44-48.
3. Каюмова Э.З., Астанин В.В., Гирфанова А.А. Зависимость параметров акустической эмиссии титана от температуры механических испытаний. Письма о материалах. 2013. Т.3. Вып. 3. С. 193-197.
4. Дмитриев А.А., Поляков В.В., Лепендин А.А. Исследование пластической деформации алюминиевых сплавов с использованием вейвлет-преобразований сигналов акустической эмиссии. Письма о материалах. 2018. Т. 8. Вып. 1. С. 33-36.
5. Дмитриев А.А., Поляков В.В., Рудер Д.Д. Применение метода главных компонент к исследованию сигналов акустической эмиссии в алюминиевых сплавах. Известия АГУ. 2018. №1. С. 19-23.

DOI: 10.17223/9785946218412/313

**ПРИМЕНЕНИЕ EBSD-АНАЛИЗА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В СВАРНЫХ ТРУБАХ ИЗ
СТАЛИ 13ХФА**

¹Горкунов Э.С., ¹Задворкин С.М., ¹Горулева Л.С., ¹Путилова Е.А., ²Мальцева А.Н.

¹*ИМАШ УрО РАН, Екатеринбург*

²*ОАО "РОСНИТИ", Челябинск*

sherlarisa@yandex.ru

Индукционная сварка является одной из прогрессивных технологий получения неразъемных соединений металлоизделий, в частности, труб различного назначения. Для индукционной сварки характерна небольшая (несколько десятков микрометров) ширина шва и околошовной зоны. Это обстоятельство затрудняет контроль остаточных напряжений в таких сварных соединениях широко применяемыми методами рентгеноструктурного анализа ввиду сравнительно больших размеров пучков рентгеновских лучей, генерируемых специализированными рентгеновскими дифрактометрами для определения остаточных напряжений. В то же время такой контроль необходим, поскольку остаточные напряжения во многом определяют конструктивную прочность сварных изделий. Представляет интерес сопоставление результатов определения остаточных напряжений в сварном соединении, полученном индукционной сваркой, рентгеновским методом и методом EBSD-анализа, который имеет гораздо более высокую локальность.

Объектом исследования служила сварная труба нефтегазового сортамента, полученная методом индукционной сварки. Материал трубы - сталь 13ХФА, обеспечивающая повышенную надежность труб при эксплуатации в агрессивных средах, что особенно актуально при добыче нефти и газа с высоким содержанием сероводорода, диоксида углерода и других коррозионно-активных примесей.

В докладе приведены результаты исследования с помощью оптической микроскопии структуры металла различных зон сварной трубы (основной металл, околошовная зона и сварной шов). Установлено, что ширина шва составляет примерно 15...20 мкм, кардинальных отличий структуры околошовной зоны и основного металла не обнаружено. Однако измерения микротвердости показали, что на участках шириной примерно 50...60 мкм по обе стороны от сварного шва наблюдается повышенные значения микротвердости металла (примерно на 10...20% выше микротвердости основного металла). Рентгеноструктурные исследования проводили с использованием рентгеновского луча диаметром 2 мм. Эти эксперименты показали, что в основном металле трубы остаточные напряжения в тангенциальном направлении распределены равномерно по окружности, в то время как на участках шириной около 25 мм по обе стороны сварного шва обнаружены значительные, до 100 МПа, скачки остаточных напряжений.

Структурные исследования основного металла, околошовной зоны и сварного шва проводили также с помощью электронной сканирующей микроскопии при диаметре электронного луча диаметром порядка 1 мкм. По результатам EBSD-анализа проведена качественная оценка распределения остаточных напряжений в отдельных зернах металла из различных зон сварной трубы. Проведено сопоставление этих данных с данными рентгеноструктурного анализа, оптической микроскопии и дюротри.

При выполнении работы использовано оборудование ЦКП «Пластометрия».

DOI: 10.17223/9785946218412/314

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕПЛООВОГО КОНТРОЛЯ В
КОНСТРУКЦИИ С СОТОВЫМ ЗАПОЛНИТЕЛЕМ**

Аношкин А.Н., Головин Д.В., Пеленев К.А., Осокин В.М.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

Полимерные композиционные материалы (ПКМ) в настоящее время находят широкое применение в конструкции авиационных двигательных установок. В составе отечественного авиационного двигателя ПД-14 предусмотрены такие изделия из ПКМ, как створка капота, лопатка спрямляющего аппарата, рабочая лопатка вентилятора, шпангоут реверсивного устройства, передний корпус рабочего вентилятора, створка реверсивного устройства, элементы звукопоглощающих конструкций внешнего и внутреннего контура. Одним из основных недостатков изделий из ПКМ является подверженность к образованию и накоплению межслоевых дефектов внутри монолитной слоистой структуры, и на границе соединения несущих оболочек с наполнителем. Расширение номенклатуры изделий из ПКМ современных авиационных двигателей влечёт за собой необходимость развития методов неразрушающего контроля (НК) [1].

В настоящее время наиболее перспективным методом оперативного НК является синхронная инфракрасная термография, реализуемая на базе мобильных комплексов. Преимуществами данного метода НК являются высокая производительность, а также возможность осуществления автоматизации процесса контроля и обработки данных. Данный метод позволяет выявлять дефекты как в тонкостенных и многослойных монолитных изделиях из ПКМ, так и в конструкциях с наполнителем. При этом для определения наиболее эффективных режимов теплового воздействия на различные конструктивные элементы деталей из ПКМ необходимым условием является проведение численного моделирования тепловых процессов протекающих при тепловом НК. Результаты численного моделирования позволяют заранее осуществлять.

Авторским коллективом ранее были проведены исследования в области численного моделирования процесса теплового контроля многослойных монолитных конструкций, что позволило сформировать основные подходы в решении данного типа задач и определить рациональные способы тепловых воздействий на объект исследования [2]. На текущем этапе исследований практический интерес вызывает моделирование тепловых процессов в конструктивно-подобных элементах (КПЭ) полноразмерных деталей из ПКМ с сотовым наполнителем.

В качестве объекта исследования в настоящей работе был выбран конструктивно-подобных элементах в виде трёхслойной панели с сотовым наполнителем. Верхняя оболочка образца состоит из 5 слоев углепластика на основе однонаправленного препрега со схемой армирования $[0^\circ/90^\circ/0^\circ/90^\circ/0^\circ]$, нижняя из 5 слоев стеклопластика на основе равнопрочного препрега. В качестве наполнителя был использован стеклосотопласт, соединенный с оболочками посредством пленочного клея. При этом в конструкцию панели внедрены элементы из фторопласта, имитирующие дефекты в виде отслоения оболочки от сотового наполнителя. Данные имитаторы дефектов расположены на границе соединения верхней оболочки с сотовым наполнителем.

Для численного моделирования использовался программный продукт конечно-элементного моделирования Ansys 14.5 Transient thermal. В математической модели расчета учитывались такие механизмы теплопередачи, как теплопроводность внутри материала, конвективный и лучистый теплообмен с окружающей средой. Механизм теплопроводности в модели описываются уравнением нестационарного распределения тепла в анизотропном материале. Тепловые потери с поверхности образца от конвективного и лучистого теплообмена с окружающей средой описывались законами Ньютона и Стефана-Больцмана. Предварительное решение задачи теплового контроля конструкции с сотовым наполнителем осуществлялось в плоской постановке. Такой подход позволил определить контактные

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

условия на границе между сотовым наполнителем и несущими оболочками в виде галтелей из пленочного клея.

Основными исходными данными, помимо геометрической модели, задавались значения плотности, теплоемкости и теплопроводности материалов. Учет анизотропии параметров ТФХ углепластика и стеклопластика производилось за счет указания значений теплопроводности вдоль и поперек направления волокон, а также по толщине. Учет конвективного теплообмена с окружающей средой определялся условиями температуры окружающей среды 22 °С, коэффициентом теплопередачи на границе с воздушной средой 5 Вт/м²·К. Лучистый обмен с окружающей средой определялся коэффициентом излучения углепластика равным 0,9, и стеклопластика равным 0,85. В ходе численного расчета моделировалось воздействие двух тепловых волн синусоидальной формы со значением максимальной плотности равной 3600 Вт/м² и частоты 0,0485 Гц. На рисунке 1 представлен пример полученных значений распределений температурных полей в расчётной модели. По результатам численного моделирования была произведена оценка максимального дифференциального температурного сигнала на поверхности объекта контроля, который располагался в диапазоне от 6 до 8 К для различных расчётных случаев. Была произведена оценка начала уверенного выявления дефектов, что представляет собой момент времени, при котором достигалось значение теплового контраста, превышающее типичное значение в 0,8 К. Определено, что дефекты начали уверенно проявляться в течение 7-8 секунд после начала теплового воздействия.

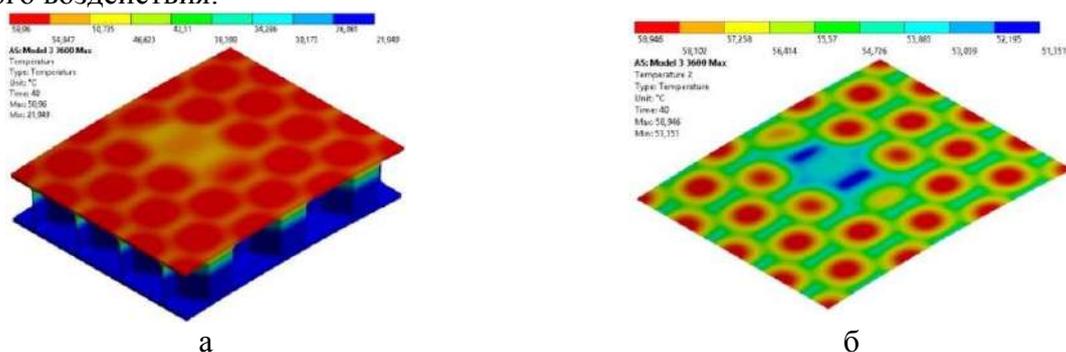


Рис. 1. Распределение температурных полей в области дефекта, а – общий вид панели, б – температурные поля на поверхности верхней оболочки

В результате проведенных исследований были получены значения тепловых полей в дефектных и бездефектных областях образцов КПЭ конструкций с наполнителем. Определены основные параметры процесса теплового контроля, такие как распределение температурного поля на поверхности объекта контроля, значение дифференциального температурного сигнала, время начала проявления дефектов. В дальнейшей исследовательской работе для оценки адекватности математической модели планируется провести сравнение результатов численного расчета с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (договор № 03.G25.31.0232) в рамках реализации Постановления Правительства РФ №218 «О мерах государственной поддержки развития кооперации российских высших учебных заведений и организаций, реализующих комплексные проекты по созданию высокотехнологичного производства».

1. Аношкин А.Н., Сальников А.Ф., Осокин В.М. и др. Неразрушающий контроль изделий из полимерных композиционных материалов // IV Всероссийская научно-практическая конференция производителей рентгеновской техники. Материалы конференции. СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2017. С. 85-90.
2. Anoshkin A.N., Golovin D.V., Pelenev K.A., Osokin V.M. Numerical Modeling of the Synchronous Infrared Thermography of Composite Materials Structures, AIP Conference Proceedings, 2051, 020015 (2018).

DOI: 10.17223/9785946218412/315

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКОЙ
ЭМИССИИ, ВОЗНИКАЮЩЕЙ В ПРОЦЕССЕ ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛА
СКОЛЬЗЯЩИМ ИНДЕНТОРОМ.**

^{1,2}Никонов А.Ю., ^{1,2}Жармухамбетова А.М.

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Анализ акустической эмиссии (АЭ) – один из наиболее распространённых методов отслеживания состояния механических систем и выявления вибраций. Отличительной особенностью данного метода является возможность выявлять различные структурные изменения без какого-либо изменения свойств или формы материала, так называемый метод неразрушающего контроля. Этот подход применяется, в том числе при производстве деталей машин, например, в процессах обработки резанием, где АЭ используют для мониторинга состояния режущего инструмента или типа стружкообразования. При этом возникает необходимость выявлять, что является источником акустического сигнала: процессы пластической деформации материала (изменение внутренней структуры) или механическое взаимодействие заготовки с инструментом в процессе обработки (трение, вибрации и т.п.). Ранее было показано, что гармоническое движение дислокаций в ходе пластической деформации кристаллитов или зёрен может являться источником акустической эмиссии. С использованием методов молекулярной динамики обнаружено, что на атомном масштабе акустическая эмиссия определяется изменениями уровней как потенциальной, так и кинетической энергии. Целью настоящей работы является изучение связи возникающих дефектов структуры и изменений внутренней энергии образца с сигналами акустической эмиссии в процессе обработки кристаллического образца скользящим индентором.

Моделируемый образец представлял собой медный прямоугольный параллелепипед размерами 36×18×9 нм. Вдоль оси Z лабораторной системы координат задавались периодические граничные условия. Ориентации кристаллической решётки были выбраны таким образом, чтоб оси X, Y и Z лабораторной системы координат совпадали с основными кристаллографическими направлениями [100], [010] и [001], соответственно. Четыре нижних атомных слоя и четыре атомных слоя в плоскости Y0Z с максимальной X координатой, были неподвижны, формируя подложку. Между подложкой и образцом задавался слой со свойствами отвода кинетической энергии атомов, позволяющий имитировать отвод температуры в объём материала. Моделируемая система рассматривалась как канонический ансамбль NVT (в системе сохраняется число атомов, объём и температура), содержащий около 400000 атомов. Температура системы составляла 1К, 5К и 100К. Низкая температура рассматривалась для исключения влияния теплового движения атомов. Расчёты проводились с использованием программного пакета LAMMPS[1]. Силы, действующие между атомами, описывались в рамках метода погруженного атома [2].

Для нагружения системы использовался «комбинированный» индентор. Подобный индентор представлял собой абсолютно жёсткий цилиндр из атомов с радиусом R_m 2нм, 4нм и 6нм в различных задачах и полевой цилиндрический индентор с радиусом $R_m+0,2$ нм. Оси инденторов совпадали и были ориентированы вдоль оси Z. Воздействием материального индентора обеспечивались адгезионные свойства за счёт взаимного притяжения атомов. На атомы образца, попадающие внутрь области полевой индентора, действовали силы по направлению от оси цилиндра, что позволяло уменьшить силы адгезии между атомами образца и индентора. Индентор двигается в направлении оси X с постоянной скоростью 10 м/с. Для получения сигналов акустической эмиссии на поверхности и в объёме образца в плоскости Y0Z выделялись площадки размерами 2×3×9 нм и 2×4×9 нм. Анализировались силы, действующие на данные сенсорные площадки и скорости движения центра масс сенсорных площадок. Визуализация и анализ структуры проводился с использованием программы OVITO [3]. Для изучения внутренней структуры применялся метод анализа

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

ближайших соседей (common neighbor analysis) [4] и алгоритм извлечения дислокаций (dislocation extraction algorithm) [5]. Первый метод по координатам ближайших соседей позволяет определить тип кристаллической структуры (ОЦК, ГЦК, ГПУ), в узле которой расположен атом, а второй обнаруживает дислокации определённого вида в кристаллах.

Анализ структуры образцов в различные моменты времени показал, что дефекты структуры формируются непосредственно в области контакта индентора с поверхностью образца. При дальнейшем нагружении они распространяются в объём моделируемой системы. Движение и взаимодействие дислокаций, а также их выход на поверхность сопровождаются коллективным движением группы атомов в одном направлении, что обуславливает явно выраженное изменение колебаний центра масс сенсорной площадки, которое заключается в резком увеличении амплитуды. При высоких температурах сигналы отдельных дефектов теряются на фоне колебаний сил. В этом случае применяется фильтр, основанный на Фурье анализе и отсекающий колебания с частотой выше 50 ГГц, связанные с температурными колебаниями атомов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №17-79-10081.

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comput. Phys.* 1995. V. 117. № 1. P. 1–19.
2. Mendeleev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // *Phil. Mag.* 2003. V. 83. P. 3977–3994.
3. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 2010. V. 18. № 1. P. 15012.
4. Honeycutt J.D., Andersen H.C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // *J. Phys. Chem.* 1987. V. 91(19). P. 4950–4963.
5. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2012. V. 20. № 8. P. 085007.

DOI: 10.17223/9785946218412/316

**ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВЫСОКОРАЗРЕШАЮЩЕЙ
РЕНТГЕНОВСКОЙ КОМПЬЮТЕРНОЙ ТОМОГРАФИИ ДЛЯ КОНТРОЛЯ
МИКРОСТРУКТУРЫ КОМПОЗИТОВ В4С**

¹Коробенков М.В., ¹Нарикович А.С., ²Левков Р.В., ¹Снигирев А.А.

¹*Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград*

²*Томский государственный университет, Томск*

Высокопрочные керамики на основе карбида бора привлекают особое внимание в областях, где требуется высокая твердость и хорошая износостойкость, например в качестве струйных сопел, инструментов для правки колес и легких броневых плит. Поскольку карбид бора имеет широкую область поглощения теплых нейтронов, он активно используется в ядерной промышленности в качестве таблеток и защитных экранов поглотителей нейтронов. Для достижения оптимальных свойств изделий из карбида бора требуется контроль изготовления на каждом этапе производства, начиная с определения дисперсности порошковой системы и структурно-фазового состояния и заканчивая определением внутренней микроструктуры полученных образцов. Современные методы определения микроструктуры очень затратны по времени, и включают в себя подготовку поверхности образцов с последующим травлением. В данной работе предложен метод определения дисперсности порошковой системы и внутренней микроструктуры с помощью высокоразрешающей компьютерной томографии.

Оценка дисперсности порошковой системы проводилась с использованием томографа Y.Cheetah фирмы "YXLON". Основными компонентом системы является микрофокусная рентгеновская трубка с анодом-мишенью пропускающего типа, которая генерирует конический рентгеновский луч. Мишень представляет собой слой вольфрама толщиной 6 мкм, напыленного на алмазное окно. Система фокусировки электронного пучка формирует фокусное пятно размером менее 2 мкм на мишени, что обеспечивает высокий контраст на изображениях и позволяет проводить оценку внутренней структуры с высокой точностью визуализации. Порошки карбида бора предварительно подверглись мехактивации в планетарной мельнице в течение трех и шести минут. Полученные порошковые системы были помещены в полимерные стержни диаметром 1.5 мм. Режимы сканирования образцов подбирали с учетом особенностей дисперсности порошковой системы. Полученные результаты показали наличие крупных осколков неправильной формы со средним размером 20 микрон и более мелкой фракции порядка 8 микрон. Мехактивация привела к значительному уменьшению крупных фракций порошка и получению более гомогенному распределению по размерам с увеличением удельной поверхности с 3.96 м²/г до 5.98 м²/г (180 секунд мехактивации) и 8.12 м²/г (360 секунд мехактивации).

Из полученных порошков методом горячего прессования были изготовлены цилиндрические образцы. Процесс изготовления включал изостатическое прессование 7.5 кН с одновременным нагревом до температуры 1800°C в течение 15 минут и высокотемпературной выдержкой в течение 20 минут. Остывание образцов проходило вместе с печью до комнатной температуры.

Оценку внутренней микроструктуры полученных образцов проводили с использованием томографа Y.Cheetah фирмы "YXLON". Режимы сканирования подбирали с учетом микроструктурных особенностей образцов. Трехмерную визуализацию полученных образцов проводили с использованием программного комплекса VGStudio, в котором данные восстанавливаются по алгоритму Фельдкампа. Работа с 2D-изображениями выполнялась в режиме многоплоскостной реконструкции. Результаты исследований показали наличие микродефектов, связанных с присутствием свободного углерода.

Исследование было поддержано из средств субсидии, выделенной на реализацию Программы повышения конкурентоспособности БФУ им И.Канта.

DOI: 10.17223/9785946218412/317

**АНАЛИЗ ИЗМЕНЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ И ТЕПЛОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
КОНСТРУКЦИОННЫХ СТАЛЕЙ ПОСЛЕ ДЛИТЕЛЬНОЙ ЭКСПЛУАТАЦИИ**

¹Смирнов А.Н., ¹Абабков Н.В., ²Данилов В.И., ¹Пимонов М.В.

¹Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, Кемерово

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Представлены результаты анализа механических, в том числе локализации пластической деформации, и тепловых характеристик металла теплоэнергетического оборудования после длительной эксплуатации, изготовленного из конструкционных сталей. Исследовались образцы сталей 20 и 12Х1МФ, в исходном состоянии, а также после эксплуатации в течение 219 и 360 тысяч часов соответственно.

Установлено, что изменилась структура, механические и тепловые свойства материалов. По сравнению с исходным состоянием в стали 20 средний размер ферритных зерен увеличился по отношению к исходному состоянию в четыре и в два раза соответственно. Морфологические особенности состоят в том, что на фоне темной перлитной составляющей, окруженной сеткой из полиэдрических зерен феррита, хорошо видны иглы, видманштеттового феррита, расположенные внутри перлитных колоний параллельно друг другу. Доля видманштеттового феррита в структуре стали составила ~ 23 % от всего объема ферритной составляющей. Произошла трансформация диаграммы растяжения, на которой после эксплуатации отсутствует площадка текучести. Пластичность стали после эксплуатации уменьшилась в два раза, а прочность существенно не изменилась.

Микроструктура стали 12Х1МФ в исходном состоянии представляет собой феррито-перлитный агрегат. Доля перлита составляет 0,12, что соответствует массовому содержанию углерода 0,096 %. Средний размер полиэдрических равноосных ферритных зерен составляет $20,4 \pm 9,4$ мкм, а перлитных колоний – $14,8 \pm 7,6$ мкм. Перлит имеет пластинчатое строение, границы зерен четкие. На некоторых участках границ обнаруживаются цепочки вторичных фаз (карбидов), на границах выделений нет. Внутри ферритных зерен карбиды наблюдаются сравнительно редко. После эксплуатации структура стали 12Х1МФ претерпела существенные изменения: значительно уменьшилась доля перлитной составляющей до 0,05, и в два раза уменьшился средний размер перлитных колоний до $7,9 \pm 3,1$ мкм. Тенденция к уменьшению содержания перлита в разрушенном состоянии проявилась еще более ярко. Структура стали в этом состоянии, по существу, представляет собой смесь феррита с небольшим содержанием карбидов.

Наибольшие изменения произошли в характере локализации деформации материала при одноосном растяжении. Методом DIC (digital image correlation) обнаружено, что на начальном этапе нагружения в эксплуатировавшем металле не происходит формирования подвижных фронтов локализованной деформации, связанных с распространением полос Чернова – Людерса, зато задолго до появления видимой шейки разрушения появляется устойчивая зона локализации макродеформации. Положение такой зоны совпадает с местом, где в дальнейшем происходит разрушение. Похожая картина наблюдалась и для стали 12Х1МФ. Время появления устойчивой зоны локализации макродеформации коррелирует с общим временем растяжения образца до разрушения. Соотношение этих времен характеризует ресурс израсходованной пластичности материала до разрушения и может быть в перспективе использовано для разработки деформационного критерия для диагностики состояния теплоэнергетического оборудования.

В процессе длительной эксплуатации изменились и тепловые характеристики исследованных сталей, а именно скорость увеличения температуры в процессе нагружения после упругопластического перехода, а также максимальная температура при разрушении.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук России на 2013-2020 годы. При выполнении экспериментальных исследований использовалось научное оборудование Центра коллективного пользования «Нанотех» при ИФПМ СО РАН.

DOI: 10.17223/9785946218412/318

**SIMULATION OF ALUMINUM PANEL DAMAGE DETECTION
USING ULTRASONIC LAMB WAVES**

^{1,2}Burkov M.V., ¹Byakov A.V.

¹*Institute of strength physics and materials science, Tomsk, Russia*

²*Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

Today there is a rapid development of structural health monitoring (SHM) which is based on the evaluation of various structural parameters using embedded sensor system. The registered data after digital processing can provide useful information about the presence of damages, material degradation, etc. Recent papers show the increasing interest to ultrasonic guided waves for SHM. But in order to design robust SHM systems sophisticated algorithms of damage detection are to be developed. One of the powerful methods of data processing is using of artificial neural networks which should be trained for exact structural application. For extensive training one should perform large amount of experimental testing with different location, type and severity of damages that is very time consuming and expensive. These experiments can be replaced with simulation using computer models. But in order to provide reliable data the models should be carefully tuned and verified. The paper present the results of finite element method simulation of Lamb wave testing of aluminum panel.

The aluminum panel with a size of 500x500 mm 3 mm thick was simulated using ABAQUS software and explicit solver. The maximum size of the element was 1 mm resulting in the formation of the mesh with 3-elements through thickness. The network of actuator-sensor system consisted of 4x4 transducers which are modeled as a set of elements on the surface of the panel. Each set can be used either an actuator or a sensor resulting in 132 actuator-sensor pairs obtained for the 4x4 network. Hanning window-modulated 5-cycle sine wave was used as a testing signal; there were 3 frequencies: 50, 100 and 200 kHz. The sensor response was measured as a plot of ϵ_{zz} stress component by time. After the simulation of the pristine aluminum panel the damaged one was simulated as well. The damages were 1 mm wide cracks with the length of 5, 15 and 25 mm. Then the obtained signals were analyzed using previously developed software based on the analysis of attenuation of ultrasonic waves due to emergence of damage. In order to assess the state of tested object one should compare registered signals for initial (baseline) and damaged states for each actuator-sensor pair using following parameters: dA – difference of envelopes and dP – difference of Fourier spectrum energy.

Baseline and damaged states are compared in the software to calculate location and severity of damage. For each actuator-sensor pair dA and dP are calculated and sorted in ascending order thus the pairs with the highest decrease of amplitude or energy are in the upper part of the list. Then N pairs (paths) are selected from the top of the list and used for damage location procedure. After the paths are chosen the intersection points are found. For each pair of paths there is no more than one intersection point having its weight equal to product of dA or dP of two paths producing this intersection. Damage location is calculated as mean of the obtained intersection points: $r = \sum r_i \cdot w_i / \sum w_i$, where r_i and w_i are coordinates and weight of i -th intersection point. Damage index $DI = \sum w_i / n$, where n is a number of intersection points, describes the severity of the damage: the higher the index the more the damage is severe.

The results of location of the crack are presented and discussed in terms of accuracy of detection and sensitivity to the damage severity.

Acknowledgements

This work was performed within the frame of the Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013-2020, line of research III.23 and with a partial support of RF President Council Grant for the support of leading research schools NSh-5875.2018.8.

DOI: 10.17223/9785946218412/319

**SIMULATION AND EXPERIMENTAL VERIFICATION OF THE PROCESS OF
DAMAGE DETECTION OF CFRP SUBJECTED TO DROP-WEIGHT IMPACT
LOADING**

^{1,2}Burkov M.V.

¹*Institute of strength physics and materials science, Tomsk, Russia*

²*Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

Carbon fiber reinforced polymers (CFRP) are widely applied in different industries. The benefits provided by these materials determine their wide usage in newly designed aircrafts: Boeing 787 and Airbus 350XWB have about 50% wt. of CFRPs in the structure. However there are drawbacks: e.g. susceptibility to impact damaging and lack fracture toughness of due to viscoelastic deformation behavior. Thus impacts during aircraft operation lead to the formation of large amount of barely visible impact damages (BVID) which can evolve producing large delamination. Any formed damages should be detected and repaired timely but the areas of aircraft skins are quite large demanding fast and productive non-destructive testing (NDT) to reduce maintenance time.

Conventional ultrasonic NDT method is applicable to testing of CFRP, but time consuming due to small scanning area and manual operation. Due to non-contact and full-field application shearing speckle pattern interferometry (or shearography) is a robust NDT method which measures the strain of the testing object directly. Analysis of the strain fields for non-homogeneities allow revealing damages and flaws in different structures.

The paper deals with application of newly designed shearographic device and developed software for detection on damages of different CFRP specimens subjected to impact loading. Based on the previous studies the robust algorithm for digital processing of speckle images was established. It is based on the sin/cos filtering with iterative approach providing smooth high contrast phase map without loss of phase information. The device utilizes 5 Mpx CCD image sensor and five step phase shifting technique using piezodriven mirror in order to retrieve relative phase change.

The tests were carried out on laminate and honeycomb panels with the sizes of 300x300 mm. The experimental testing of the technique consists in detection of BVID of honeycomb panel obtained using drop-weight technique. The obtained shearograms easily revealed the BVIDs as non-uniformities in the strain fields. The honeycomb specimens show the regular texture associated to the core while stacking of plies in the laminate is easily seen in the shape of straight lines coincidental to the direction of reinforcement. The results are analyzed and discussed in view of sensitivity of shearography to BVID and delamination.

The same process was simulated using ABAQUS FEM software. The obtained data was compared with experimental results and discussed in terms of the sensitivity of digital shearography to the depth of damage location and possibility of its stable detection.

Acknowledgements

This work was performed within the frame of the Fundamental Research Program of the State Academies of Sciences for 2013-2020, line of research III.23 and with a partial support of RF President Council Grant for the support of leading research schools NSh-5875.2018.8 and RF President grant SP-2167.2016.3.

DOI: 10.17223/9785946218412/320

**КОМПЛЕКСНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ ПОДХОД ОБНАРУЖЕНИЯ
ДЕФЕКТОВ В УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНОМ КОМПОЗИТЕ МЕТОДАМИ ЛАЗЕРНОЙ
ВИБРОМЕТРИИ И ОПТИЧЕСКОЙ ТЕРМОГРАФИИ**

¹Красновейкин В.А., ¹Дружинин Н.В., ^{1,2}Дерусова Д.А., ²Шпильной В.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

Проведение неразрушающего контроля (НК) композитов является важным этапом производства и тестирования материалов и изделий в авиационной и ракетно-космической промышленности. Возникновение дефектов в конструкциях также возникает в процессе их эксплуатации, что может впоследствии привести к остановке функционирования изделия, а также его разрушению. В связи с этим, проведение неразрушающего контроля необходимо для обеспечения надежной эксплуатации, а также ранней диагностики состояния материалов.

К основным методам НК относят тепловой, ультразвуковой, рентгеновский контроль, вихрековый и т.д. Однако использование одного метода для тестирования композитов не может дать исчерпывающую информацию о состоянии материала и его повреждениях ввиду характерных особенностей условий проведения каждого отдельного вида контроля, разрешающей способности метода и ограничений условий проведения тестирования. В связи с этим, для получения детальной информации о состоянии тестируемого объекта целесообразно проведение комплексной диагностики композитов с использованием синтеза данных нескольких методов НК.

В настоящей работе приводятся результаты теплового контроля и лазерной виброметрии пластины углерод-углеродного композита КМ 934-361 УУ КМ 31, имеющей 12 ударных повреждений энергией 5 Дж. Проведение комплексной диагностики позволило обнаружить все имеющиеся дефекты путем синтеза данных, а также повысить точность и информативность контроля качества.

При тепловом контроле мощность излучателя составила 1 кВт, время нагрева 5 с, частота кадров 5 Гц. Результаты исследования стороны А были проанализированы с использованием метода главных компонент, в результате чего выявлены все дефекты, согласно карте их нанесения.

При исследовании стороны В с использованием преобразование Фурье для обработки данных были обнаружены дефекты № 1, 4, 5, 8, 9, 12. Использование метода главных компонент в свою очередь позволило локализовать все имеющиеся неоднородности.

При проведении двустороннего теплового контроля, нагреву подвергалась сторона А, в то время как инфракрасная камера регистрировала показания с оборотной стороны Б. Корреляция отдельных пикселей с массивом температурных значений выявила дефекты № 4, 5, 8, 9. Результаты исследования температуропроводности материала методом Паркера выявили все неоднородности, а также проявили его структуру. Значения температуропроводности для бездефектной области пластины и зоны дефекта отличаются более чем в 2 раза и равны $3.5 \times 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ и $1.2 \times 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ соответственно.

Проведение контроля качества методом лазерной виброметрии осуществлялось при возбуждении акустических волн под углами 0, 45, 90 градусов к направлению волокон. Наибольшее количество дефектов было выявлено при угле 0 градусов. При угле 0 градусов выявляется 8 дефектов. При угле 45 градусов выявляется 3 дефекта. При угле 90 градусов выявляется 7 дефектов. Установлено, что наиболее полно дефекты проявляются при сканировании лицевой стороны А образца.

Проведен неразрушающий контроль композита методом лазерной виброметрии и тепловым. Определены оптимальные параметры проведения комплексного неразрушающего контроля. Выявлены все имеющиеся дефекты

Исследование проведено в рамках ПФНИ ГАН на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/321

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ ПРИ ИНТЕНСИВНОМ ТРЕНИИ
УМЗ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ИК ТЕРМОГРАФИИ**

Филиппов А.В., Тарасов С.Ю

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Совокупное влияние деформационных процессов и фрикционного нагрева может способствовать осуществлению различных технологических операций или быстрому катастрофическому разрушению изделий и механизмов. Положительный эффект фрикционного нагрева используется в технологии сварки трением с перемешиванием для формирования прочных неразъемных соединений из разных конструкционных материалов. Но также существуют и множество отрицательных эффектов от фрикционного нагрева. Например, в процессе торможения железнодорожного состава происходит резкий рост температуры в пределах контактных площадок. Из-за нагрева исходная перлитная рельсовая сталь трансформируется в мартенсит и образуются термически индуцированные дефекты, которые способствуют ускоренному разрушению рельса.

В связи с вышесказанным важной научно-технической задачей является определение температурного режима работы узлов трибосопряжения. Это позволит не только рационально подобрать материал, но и установить оптимальные режимы работы оборудования и машин. Для решения этой задачи требуется достоверная теоретическая и экспериментальная оценка температуры фрикционного нагрева. Наиболее современным экспериментальным методом исследования температурного поля является ИК термография. Поскольку с повышением температуры изменяется излучательная способность тела, постольку требуется тарировка оптической системы тепловизора для обеспечения точности измерений температуры в различном диапазоне. В процессе трения происходит значительный нагрев исследуемого образца и контртела. Высокие температуры могут стать причиной динамической рекристаллизации и структурно-фазовых превращений в материале. Особенно чувствительными к повышению температуры в процессе деформации являются объемные ультрамелкозернистые материалы. Формирование УМЗ структуры в материале способствует повышению его износостойкости, но температурная чувствительность может свести на нет этот эффект.

Целью работы является экспериментальное исследование температуры в условиях интенсивного трения скольжения материалов с ультрамелкозернистой структурой.

Экспериментальное исследование осуществлялось с использованием ИК тепловизора FLIC A655SC. В процессе интенсивного трения образуются продукты износа (мелкие частицы оксидов и фрагменты стружки) которые могут засорять объектив камеры и тем самым ухудшать качество изображения и искажать регистрируемые данные о температуре. Для защиты камеры от этих частиц достаточно использования простого корпуса из тонкой жести. Сложнее обеспечить защиту объектива от частиц износа. Поскольку оптическая система тепловизора работает в области ИК излучения, постольку следует применять стекла, которые пропускают излучение ИК диапазона без искажения. В настоящей работе в качестве защитного стекла использовался диск селенида цинка. ZnSe имеет пропускную способность в диапазоне from 600nm to 16µm и часто используется в приложениях ИК оптических систем, медицинской технике и мощных лазерных системах. После тарировки тепловизора осуществлялось измерение температуры в зоне трения. В качестве исследуемых образцов использовались сталь 12X18H10T, алюминиевый сплав 5052 и медь М1 с УМЗ структурой. В качестве контртел использовались закаленные диски из стали 95X18. Трение осуществлялось со скоростями 0,25, 0,5 и 1 м/с при действующем на образец нагрузке 4 МПа.

Из-за низкой теплопроводности стали происходит локализация нагрева вблизи поверхности трения. При этом держатель образца практически не нагревается. При рассматриваемых режимах трения температура вблизи зоны фрикционного контакта достигает 161°C при скорости скольжения 0,25 м/с, 270°C при 0,5 м/с и 400°C при 1 м/с. Для

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

начала рекристаллизационных процессов в рассматриваемой стали требуется температура порядка 500-550°C. Высокая теплопроводность образцов алюминиевого сплава 5052 способствует быстрому нагреву держателя. При рассматриваемых режимах трения температура вблизи зоны фрикционного контакта достигает 160°C при скорости скольжения 0,5 м/с и 185°C при 1 м/с. Полученных температур не достаточно для начала рекристаллизационных процессов в сплаве 5052 с УМЗ структурой. Для большинства сплавов системы Al-Mg требуется нагрев до температуры как минимум 200°C для начала рекристаллизационных процессов в УМЗ состоянии. Высокая теплопроводность медных образцов способствует быстрому отводу теплоты из зоны фрикционного контакта в стальной держатель. При трении со скоростью 0.5 м/с максимальная регистрируемая температура не превышает 110°C, с увеличением скорости скольжения до 1 м/с температура повышается максимум до 164°C. Наивысшая температура регистрируется вблизи зоны фрикционного контакта и монотонно уменьшается в направлении к стальному держателю. Для начала рекристаллизационных процессов в УМЗ меди достаточно 10 минут при 100°C и 3 минут при 160°C. Следовательно при выбранных условиях трения будут происходить рекристаллизационные процессы почти во всем объеме исследуемого образца.

Во всех рассмотренных случаях температура в зоне фрикционного контакта далека от температуры начала рекристаллизации крупнокристаллических, а в большинстве случаев недостаточна и для УМЗ материалов. Однако, указанные температуры характерны для начала рекристаллизации в условиях статического нагрева в печи. При интенсивной пластической деформации уже при более низких температурах обеспечивается условие достижения сверхпластичности. В свою очередь трение скольжения характеризуется развитием интенсивных деформационных процессов в приповерхностном слое материала. Эти процессы приводят к формированию ультрамелкозернистой и нанокристаллической структуры, которая является менее устойчивой по отношению к интенсивной деформации при повышенных температурах. Из вышесказанного следует, что требуется аккуратнее подходить к вопросу выбора УМЗ материалов в качестве изделий трибологического назначения.

В ходе экспериментальных исследований с применением метода ИК термографии установлено распределение температуры в зоне фрикционного контакта при интенсивном трении скольжения стали 12X18H10T, алюминиевого сплава 5052 и меди М1 с УМЗ структурой. При трении материалов с высокой теплопроводностью происходит нагрев держателя, что частично поддерживает высокую температуру во всем объеме образца, а не только вблизи поверхности трения. Низкая теплопроводность стали способствует локализации температуры в приповерхностном слое материала. Выявленные температуры свидетельствуют о возможности развития рекристаллизационных процессов в условиях интенсивного трения УМЗ материалов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Российской академии наук на 2013-2020 гг. (проект № III.23.2.4).

DOI: 10.17223/9785946218412/322

**ВИБРОМОНИТОРИНГ ПРОЦЕССА ТРЕЩИНООБРАЗОВАНИЯ В
ЖЕЛЕЗОБЕТОННЫХ КОНСТРУКЦИЯХ**

¹Цветков Р.В., ¹Шардаков И.Н., ¹Шестаков А.П., ¹Глот И.О.
¹*Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь*

Контроль процесса трещинообразования в железобетонных конструкциях является важной задачей, решение которой обеспечивает оценку функциональной пригодности конструкций. Эффективным средством решения таких задач является реализация мониторинга деформационного состояния элементов железобетонных конструкций. В настоящее время существует множество средств, методов и подходов по организации такого мониторинга – от простого осмотра до устройства современных автоматических систем, работающих в он-лайн режиме.

Исторически первыми были визуальные методы наблюдения. Однако они позволяют обнаружить лишь видимые повреждения, в то время как скрытые, но не менее опасные дефекты остаются недоступными для идентификации. Кроме того, качество проведенной оценки в значительной степени зависит от навыка человека, осуществляющего наблюдение. К существенным ограничениям данного подхода можно отнести большие временные затраты при контроле конструкций больших размеров, невозможность наблюдения за местами, доступ к которым ограничен, а также сложность обнаружения дефектов на ранней стадии развития. Некоторые из перечисленных ограничений можно преодолеть с помощью применения специальных приборов, позволяющих фиксировать повреждения малых размеров и дающих объективную информацию о наличии дефекта. Такие способы обнаружения часто относят к классу локальных методов дефектоскопии, так как при их использовании исследуется лишь малая область конструкции, окружающая датчик. Для локального обследования конструкции применяются подходы, использующие регистрацию следующих физических величин: ультразвуковые волны [1], вихревые токи [2], температурные поля [3], акустическая эмиссия [4], рентгеновское излучение, магнитный метод контроля [5], метод радиолокации, механический метод дефектоскопии и т.д. Классификация видов и методов неразрушающего контроля описана в ГОСТ 18343-79 [6]. В работе [7] представлен обзор методов неразрушающего контроля применяемых к железобетонным конструкциям.

Очень важной характеристикой деформационного состояния конструкции является сам процесс появления трещин. Информация об эволюции и скорости образования трещин значима для оценки и прогноза критичности деформационного состояния конструкции.

В данной работе предлагается вариант организации вибромониторинга процесса трещинообразования в железобетонных конструкциях в он-лайн режиме. Этот вариант базируется на анализе результатов изменения собственных частот колебаний элементов конструкции. Обосновывается связь между смещениями значений собственных частот в экспериментально получаемом спектре и появлением трещин в элементах железобетонной конструкции. Одной из характерных особенностей предлагаемого подхода является то, что в качестве внешнего воздействия на конструкцию используется вибрационный внешний фон, который, как правило, всегда существует. Этот фон может быть обусловлен каким-либо технологическим оборудованием, транспортом, ветровой нагрузкой и другими источниками.

Предлагаемый подход демонстрируется применительно к конструкции, основными несущими элементами которой являются железобетонные балки, опирающиеся на колонны. Система балок и опор представляет собой периодическую структуру. На балках располагаются бетонные плиты, залитые стяжкой. Снизу опоры взаимодействуют с грунтовым основанием, а с торцов балки связаны с элементами соседних зданий.

Построена математическая модель железобетонной конструкции, в которой учтены наличие трещин и их локализация, а также структура армирования. Проведены численные эксперименты, в которых проанализированы изменения собственных форм и частот колебаний конструкции при возникновении трещин. При этом рассмотрены два различных

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

вариантах расположения трещин. Анализ результатов приведенных расчетов позволил определить собственные частоты, наиболее чувствительные к появлению трещин, локализованных в разных частях рассматриваемой конструкции, а также оценить необходимую точность измерений для надежной регистрации появления трещин.

В соответствии с результатами расчета на элементах конструкции установлена система мониторинга на основе трехкомпонентных вибродатчиков, которые осуществляют регистрацию колебаний элементов конструкции в необходимом частотном диапазоне, установленном по результатам численного моделирования. В рассматриваемом случае основным фактором, определяющим внешнее вибрационное воздействие, является нагрузка от транспорта, проходящего вблизи конструкции. Экспериментально полученные виброграммы обрабатывались с использованием фурье- и вейвлет-анализа. Результаты обработки виброграмм позволили надежно регистрировать изменения низших собственных частот, обусловленные появлением трещин в железобетонные балках.

1 Raghavan A., Cesnik C.E.S. Review of Guided-wave Structural Health Monitoring // *The Shock and Vibration Digest*. 2007. V. 39. № 2. P. 91–114.

2 Grimberg R., Premel D., Savin A., Le Bihan Y., Placko D. Eddy current holography evaluation of delamination in carbon-epoxy composites // *Insight*. 2001. V. 34. № 43. P. 260-264.

3 Maldague X.P.V. *Nondestructive Evaluation of Materials by Infrared Thermography*. Springer London, 2011. 207 p.

4 Ермолов И.Н., Алешин Н.П., Потапов А.И. *Акустические методы контроля*. М.: Высшая школа, 1991. 283 с.

5 Чихунов Д. Методы и приборы неразрушающего контроля физических свойств бетонов // *Строительная Инженерия*. 2005. № 3. С. 55-59.

6 ГОСТ 18353-79. *Контроль неразрушающий. Классификация видов и методов*. М.: Изд-во стандартов, 1987. 13с.

7 Verma S.K., Bhadauria S.S., Akhtar S. Review of non destructive testing methods for condition monitoring of concrete structures // *Journal of Construction Engineering*. 2013.

DOI: 10.17223/9785946218412/323

**ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА РАСЧЕТА J-ИНТЕГРАЛА
ПО ДАННЫМ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКОГО ПОТОКА
ПРИ МЕХАНИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЯХ МАТЕРИАЛОВ**

¹Титков В.В., ^{1,2}Панин С.В., ¹Ерёмин А.В., ¹Любутин П.С., ³Козулин А.А.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский политехнический университет, Томск

³Томский государственный университет, Томск

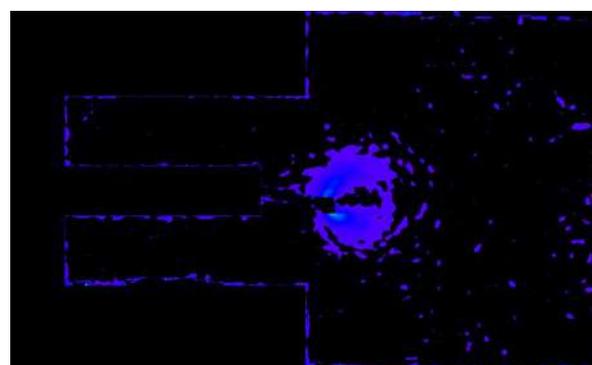
Метод корреляции цифровых изображений (DIC) [1, 2] приобретает все большую популярность за счет своей универсальности, удобства использования, а также возможности получения полноразмерных полей смещений/деформаций по фотографиям поверхности объекта. На основе получаемых полей становится возможным дальнейшее определение требуемых параметров состояния, например таких как, КИН, СТOD, J-интеграл.

J-интеграл, предложенный Райсом в 1968 году [3, 4, 5], определяется как независимый от пути линейный интеграл, который характеризует напряжения и деформации наконечника трещины под действием упругих и / или эластопластических материалов. Согласно определению J-интеграла он является независимым от пути интегрирования и это свойство соблюдается при работе с модельными данными [6], однако в реальном эксперименте за счет ошибок в определении смещений, получаемых методом корреляции цифровых изображений, независимость от пути интегрирования не выполняется [7].

Неопределенность решения задачи выбора контура интегрирования вызвана зашумленностью первичных данных и ошибками определения полей методов DIC. Данная задача может быть решена применением алгоритма постобработки векторных полей и выделения трещины на базе конечных элементов с предварительным расчётом приемлемых отклонений перемещений (рис. 1).



а



б

Рис.1. Поле зоны пластики до (а) и после (б) постобработки.

Было проведено сравнение получаемых результатов J-интеграла с использованием метода корреляции цифровых изображений с данными (табл. 1), рассчитанными согласно стандарту ASTM E 1820 Standard Test Method for Measurement of Fracture Toughness для расчета J-интеграла. Подходы были применены к результатам одноосного растяжения компактного образца (толщиной 10 мм с предварительно пророщенной усталостной трещиной длиной 21.8 мм, рис. 2) из алюминиевого сплава Д16 (модуль упругости сплава равен 71000 МПа, коэффициент Пуассона 0.33, условный предел текучести 286.7 МПа).

Для получения количественной оценки «точности» и помехоустойчивости расчёта J-интеграла предложено использовать следующую расчетную величину:

$$D = \left| \frac{J_{ASTM} - J_{расч}}{J_{ASTM_{max}}} \right| * 100\%,$$

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

где J_{ASTM} – величина J-интеграла полученная согласно стандарту ASTM E 1820 Standard Test Method for Measurement of Fracture Toughness, $J_{расч}$ – рассчитанное значение J-интеграла.

Согласно стандарту ASTM E 1820 Standard Test Method for Measurement of Fracture Toughness были рассчитаны значения J-интеграла. Отклонение величины J-интеграла изменяется от 0.695% до 4.088%, при этом средняя ошибка для используемых величин нагрузки составляет 1.753%, что говорит о применимости метода корреляции цифровых изображений для измерения J-интеграла на практике.

Благодарности. Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований государственных академий наук (2013–2020 гг.) по теме 23.1.3, грантов Президента РФ № МК-6762.2018.9, № НИШ-5875.2018.8, № СП-198.2018.4, гранта РФФИ № 18-47-700006, гранта Российского научного фонда № 18-71-00087.

1. G. P. Cherepanov, Advances in Two-Dimensional and Three-Dimensional Computer Vision, Photomechanics, V. 77, 2000, pp. 323–372.
2. M. A. Sutton, J.-J. Orteu, H. Schreier. Image correlation for shape, motion and deformation measurements: basic concepts, theory and applications / Springer, 2009. –321 p.
3. G. P. Cherepanov, The propagation of cracks in a continuous medium, Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 31(3), 1967, pp. 503–512.
4. J. R. Rice, A Path Independent Integral and the Approximate Analysis of Strain Concentration by Notches and Cracks, Journal of Applied Mechanics, 35, 1968, pp. 379–386.
5. D. Vavrik, I. Jandjsek, Experimental evaluation of contour J integral and energy dissipated in the fracture process zone, Engineering Fracture Mechanics, V. 129, 2014, pp. 14–25.
6. V.V. Titkov, S.V. Panin, A.V. Eremin, A.A. Kozulin, P.S. Lyubutin, Algorithm for J-integral measurement by digital image correlation method / AIP Conference Proceedings, 2051 (2018) 020305.
7. J. Tracy, A. Waas, S. Daly, Experimental assessment of toughness in ceramic matrix composites using the J-integral with digital image correlation part I: methodology and validation / Journal of Materials Science 50(13) 2015, pp 4646–4658

DOI: 10.17223/9785946218412/324

RAMAN SCATTERING IN C₆₀@SWCNTS PEAPODS

^{1,2}Maslova O.A., ³Yuzyuk Yu.I., ^{1,2} Barannikova S.A.

¹National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia

²Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia

³Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia

o_maslova@rambler.ru

Raman spectroscopy is a powerful method that furnishes detailed information on various carbon allotropic forms, allowing ones materials to be distinguished from others via a set of vibrational lines, the so-called Raman “fingerprints” [1--4]. Depending on the rolling up of a graphene (2D carbon network system), one obtains a single-walled carbon nanotube (SWCNT, 1D network system) or a C₆₀ (0D) fullerene molecule, whose Raman spectra vary noticeably, enabling one to differentiate between these types of carbon materials.

SWCNTs can be filled with fullerene molecules, forming the so-called peapods, whose properties, such as flat conduction bands, are attractive in terms of a possible superconductivity by alkaline metal doping [5]. In this case, the Raman spectra of these systems contain the “signatures” of both SWCNTs and fullerenes, ensuring information on the type of encapsulating fullerene molecules, as well as on the diameter distribution of SWCNTs, receiving fullerenes.

In this respect, the present work aims the Raman spectroscopic characterization of a sample of C₆₀@SWCNTS peapods, prepared via the multistep method, in order to confirm the presence of fullerene molecules (C₆₀) inside the tubes, as well as to show the convenience of Raman spectroscopy for the non-destructive and rapid analysis of such combined-dimensionality systems. Peapods were scanned using two (514.5 and 325 nm) laser excitation wavelengths. The Raman responses of SWCNTs were distinguished from those of fullerene molecules. Furthermore, the Raman spectra of peapods, excited by a 325-nm laser beam, reveal the formation of bonds between the fullerene molecules in the nanotubes, presumably due to the laser heating (photopolymerization processes).

1. Dresselhaus MS, Eklund PC. Phonons in carbon nanotubes. *Advances in Physics*. 2000; 49(6):705-814.
2. Ferrari AC, Meyer JC, Scardaci V, Casiraghi C, Lazzeri M, Mauri F, Piscanec S, Jiang D, Novoselov KS, Roth S, Geim AK. Raman spectrum of graphene and graphene layers. *Physical Review Letters*. 2006;97:187401.
3. Milanez DH, Schiavi MT, do Amaral RM, de Faria LIL, Gregolin JAR. Development of carbon-based nanomaterials indicators using the analytical tools and data provided by the web of science database. *Mat. Res.* 2013;16(6):1282-1293.
4. Maultzsch J, Telg H, Thomsen C, Reich S. Radial Breathing Modes of Single-Walled Carbon Nanotubes: Optical Transition Energy and Chiral-Index Assignment. *Physical Review B*. 2005;72:205438-16.
5. Saito S, Okada S. Proc. Design of carbon-nanotube based materials. In: *Proceedings of the 3th Symposium on Atomic-Scale Surface and Interface Dynamics*; 1999 March 4-5; Fukuoka, Japan. p. 307-310.

DOI: 10.17223/9785946218412/325

ON THE DETERMINATION OF GRAPHENE EDGE CHIRALITY VIA RAMAN
SPECTROSCOPY

^{1,2}Maslova O.A., ³Yuzyuk Yu.I., ^{1,2} Barannikova S.A.

¹National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia

²Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia

³Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia

o_maslova@rambler.ru

The outstanding optical and magnetic properties, as well as the superconductivity, of graphene and related materials depend to a large extent on the edge chirality (zigzag or armchair) [1, 2]. So, after studying the hundreds of mechanically cleaved graphene (MCG) specimens, the authors of work [1] discovered that the angle between the edges in a MCG is multiple to 30° . This suggests that carbon atoms along the graphene edges are stacked in either the zigzag or the armchair structure. It was also shown in work [1] that, when two adjacent edges make an angle of 30° , 90° or 150° , these possess different chiralities (one is armchair and another is zigzag). If the angle is 60° or 120° , both edges are characterized by the same type of chirality (zigzag or armchair) [1]. Indeed, according to SEM and TEM data, the graphene edge is not perfectly smooth. Furthermore, the edge structure of graphene is known to induce the peculiar resonance scattering phenomena, such as double resonance [3, 4]. Double resonance processes were carefully studied in graphene and graphite that enabled one to establish their direct role in the activation of D- and 2D-bands in the Raman spectra of graphene [4]. Applying the double resonance theory and considering the one-dimensional edge, the double resonance is shown to be mainly activated by the armchair edge, yielding the higher-intensity D-band, whereas this process is forbidden at the zigzag edge (the D-band tends to zero or vanishes). Hence this speculation seems to be interesting for the determination of the edge chirality of graphene via the Raman spectroscopy.

In this respect, Raman spectroscopy is shown to be a convenient tool for the determination of the edge chirality type in graphene via the analysis of D- and G-bands in various directions within a single layer graphene (SLG), obtained via mechanical exfoliation onto a Si/SiO₂ substrate. The intensity variation in both bands, while moving along one or another direction, has enabled one to distinguish the “zigzag” and “armchair” chirality configurations in a sample under consideration.

1. K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 102 (2005), pp. 10451-10453.
2. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg. Controlling the electronic structure of bilayer graphene. *Science* 313(5789) (2006), pp. 951-954.
3. C. Thomsen, S. Reich. Phys. Double Resonant Raman Scattering in Graphite. *Rev. Lett.* 85 (2000), pp. 5214-5217.
4. P. Venezuela, M. Lazzeri, and F. Mauri. Theory of double-resonant Raman spectra in graphene: Intensity and line shape of defect-induced and two-phonon bands. *Phys. Rev. B* 84 (2011), pp. 035433-035462.

Секция 7. Аддитивные технологии формирования
материалов, изделий и конструкций
с иерархической структурой

DOI: 10.17223/9785946218412/326

**ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ ПОЛУЧЕНИЯ ОБРАЗЦОВ ИЗ
ТИТАНОВОГО СПЛАВА МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО АДДИТИВНОГО
ПРОИЗВОДСТВА НА ИХ СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА**

¹Калашников К.Н., ¹Чумаевский А.В., ¹Калашникова Т.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
sso.spektr.asu@gmail.com, tch7av@gmail.com, gelombang@ispms.ru*

Методы аддитивного производства в настоящее время являются наиболее популярными и перспективными методами получения различных металлических изделий. Во многом это связано с тем, что их использование позволяет снизить расходы материалов в связи с минимизацией механических обработок и повысить скорость производства. Одними из основных материалов, применяемых в этой области, являются титановые сплавы, используемые в авиа- и ракетостроении, а также в транспортной промышленности. Однако значительное влияние на качество получаемой продукции оказывает режим производства изделия.

На основании этого были проведены экспериментальные исследования влияния параметров процесса производства изделий из сплава ВТ6 с использованием электронно-лучевой проволоочной аддитивной технологии. Основными параметрами производства в данном случае являются ускоряющее напряжение, ток электронного луча, тип развертки электронного луча, а также скорость 3D-печати. Ускоряющее напряжение, скорость подачи и тип развертки принимались постоянными, в то время как ток луча изменялся от образца к образцу.

Было выявлено, что рабочий ток электронного луча оказывает серьезное влияние на формируемое изделие. Образец №1, полученный при рабочих токах от 35 мА на первом слое до 28 мА на последнем слое, имеет структуру, состоящую из первичных зерен β -фазы и игольчатой мартенситной α -фазы. Испытания на растяжение такого образца показали, что его предел прочности находится на уровне 878 МПа. В тоже время, образец №2, полученный при токах от 42 мА до 28 мА так же представлен первичными зернами β -фазы и пластинами α -фазы, однако размеры этих структурных элементов отличаются от образца №1. Предел прочности такого образца на растяжение равен 913 МПа.

Таким образом, повышенный ток электронного луча на первых слоях образца №2 сплава ВТ6 обеспечивает получение наиболее благоприятной структуры, которая приводит к улучшению механических характеристик готового изделия, по сравнению с образцом №1. Однако, стоит учитывать, что границы допустимых значений тока довольно малы, и при дальнейшем увеличении данного параметра может произойти образование дефектов, вплоть до разрушения изделия в процессе печати.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/327

**ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ОБРАЗЦОВ ТИТАНОВОГО
СПЛАВА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ 3D-ПЕЧАТИ**

¹Калашников К.Н., ¹Иванов А.Н., ¹Рубцов В.Е., ¹Калашникова Т.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*
sso.spektr.asu@gmail.com, ivan@ispms.ru, rvy@ispms.ru, gelombang@ispms.ru

В настоящее время методы аддитивного производства широко используются для изготовления деталей в разных отраслях промышленности. В зависимости от типа получаемого технического результата, методы аддитивного производства можно условно разделить на две группы. Первая группа – порошковые методы. Аддитивное производство изделий из порошковых материалов обеспечивает очень высокую точность изготовления сложных изделий небольших размеров. Несмотря на данное преимущество, основными недостатками данной технологии являются высокая пористость получаемых изделий и, следовательно, необходимость проведения дополнительных термических и термомеханических обработок для улучшения структуры и механических свойств. Основными представителями данной группы являются такие методы, как селективное лазерное сплавление, электронно-лучевое сплавление и другие. Ко второй группе методов можно отнести методы, использующие проволоку в качестве материала для изготовления изделий, такие как проволочную дуговую технологию и электронно-лучевую проволочную технологию. Эти методы используются для изготовления изделий достаточно крупных размеров, по сравнению с порошковыми технологиями, но при этом к ним предъявляются менее серьезные требования по точности изготавливаемых изделий. Тем не менее, точность изготовления оказывает влияние на параметры деталей, в том числе и на структуру и свойства образцов. Одним из параметров, определяющих точность изготовления, является качество получаемой поверхности образцов.

Морфология поверхности изделий, получаемых электронно-лучевым проволочным методом, была исследована с использованием конфокальной микроскопии на образцах титанового сплава ВТ6, полученных при различных условиях 3D-печати. Было выявлено, что на внешней поверхности стенок, полученных по разным режимам, хорошо выявляются первичные зерна β -фазы, так как на границах четко выделяется ступенька между соседними зернами. При этом размеры таких зерен при разных режимах значительно отличаются. При рассмотрении формируемых слоев материала было обнаружено, что образец, полученный при неоптимальном режиме, демонстрирует более высокую амплитуду «волны» одного слоя материала, что свидетельствует о неоптимальном температурном режиме и неодинаковом времени кристаллизации слоев материала в процессе печати, что приводит к изменению толщины разных участков стенки по высоте.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013).

DOI: 10.17223/9785946218412/328

**ОСОБЕННОСТИ РАЗРУШЕНИЯ ОБРАЗЦОВ СПЛАВА ВТ6, ПОЛУЧЕННЫХ
ЭЛЕКТРОННО ЛУЧЕВЫМ АДДИТИВНЫМ МЕТОДОМ**

¹Калашников К.Н., ¹Белобородов В.А., ¹Дмитриев А.В., ¹Жуков Л.Л.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
sso.spektr.asu@gmail.com, vabel@ispms.tsc.ru, allsoft@hotmail.com, mcleon@inbox.ru*

Электронно-лучевое аддитивное производство образцов из проволоки или прутка в настоящее время является одним из самых перспективных и самых малоизученных методов 3D-печати металлических изделий. Данный метод представляет собой процесс нанесения слоев расплавленного металла в соответствии с заданной трехмерной компьютерной моделью детали необходимой формы. Эта технология получила наибольшее распространение в транспортной, авиационной и ракетно-космической отраслях промышленности для изготовления крупногабаритных изделий, не требующих особой точности. Напечатанные изделия подвергаются минимальной механической обработке и, в случае если это составная деталь, свариваются методами электронно-лучевой сварки либо сварки трением с перемешиванием. Важным условием применимости таких деталей является соответствие их механических свойств свойствам литого металла. Одним из основных факторов, определяющих характеристики материала, является характер разрушения образцов. В данной работе были исследованы образцы сплава ВТ6, изготовленные по различным режимам и подвергнутые испытаниям на статическое растяжение. Особенности процесса разрушения образцов титанового сплава ВТ6, полученных методом аддитивного электронно-лучевого производства, были прослежены с помощью растровой электронной микроскопии.

Исследования показали, что основной характер разрушения образцов вязкий, наблюдается ямочный внутризеренный излом. Было выявлено, что в некоторых зонах разрушение образцов обуславливается межзеренными границами, что видно по строению изломов: проявляются очертания крупнозернистой структуры образцов. Для наиболее прочных образцов характерно отсутствие дефектов в структуре изломов. Для ряда образцов наблюдается наличие пор с достаточно крупными размерами.

Испытания образцов показывают невысокую зависимость механических свойств относительно направления приложения нагрузки. Механические свойства всей серии образцов изменяются в пределах порядка 10 – 15 %. Наибольший предел прочности на разрушение составляет 904 МПа, что находится на уровне литого сплава, предел прочности которого находится в интервале от 900 до 1100 МПа. Таким образом, метод электронно-лучевого аддитивного производства позволяет получать изделия с механическими свойствами, не уступающими свойствам литого материала.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/329

**ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ В ИЗДЕЛИИ ИЗ ЖАРОПРОЧНОГО
СПЛАВА НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ, ПОЛУЧЕННОМ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-
ЛУЧЕВОЙ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

¹Гурьянов Д.А., ¹Фортуна С.В., ¹Калашников К.Н., ¹Осипович К.С.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Жаропрочные сплавы на основе никеля (или суперсплавы) применяют для производства сложных и ответственных деталей горячего тракта современного газотурбинного двигателестроения авиационного и энергетического назначения. В настоящее время известны такие дефекты в материале изделий из суперсплавов как, разориентированные зерна, цепочки фреклов, рекристаллизационные зерна, большеугловые и малоугловые границы, поры, блочная структура. Наличие большеугловых границ зерен ведет к интенсивному межкристаллитному окислению, что в свою очередь приводит к образованию самых опасных дефектов в виде трещин. Данному дефекту подвержены сплавы с низким содержанием углерода, т.к. углерод является упрочнителем границ. Фреклы – строчки равноосных зерен в междендритном пространстве, как правило вытянутых в направлении кристаллизации. Образуются фреклы из-за конвективной турбулентности расплава - сбоя монотонного дендритного роста, сопровождающегося завихрением расплава [1]. Ориентация зерен фреклов хаотична и не имеет связи с ориентацией дендритов. В работе [2] показано, что, в основном, фреклы образуются при низких скоростях охлаждения, при которых формируется крупночешуйчатая дендритная структура с расстоянием между осями дендритов первого порядка больше 300 мкм. Фреклы оказывают вредоносное влияние на коррозионные и механические свойства материала. Блочная структура – является следствием азимутальных и аксиальных разориентировок в процессе направленного роста. Изменение аксиальной ориентации может быть связано с изгибом осей дендритов 1-го порядка в вдоль направления температурного градиента, тогда как изменение азимутальной ориентации может быть вызвано закручиванием дендритной оси 1-го порядка крутящим моментом, возникающим вследствие взаимодействия соседних дендритов в процессе роста [1]. Согласно [3] поры в жаропрочных никелевых сплавах можно разделить на три типа: кристаллизационные, гомогенизационные и деформационные. Кристаллизационные поры имеют неправильную форму, повторяющую вид междендритного пространства, и располагаются на малоугловых границах. Данные поры образуются из-за того, что в процессе роста, оси дендритов 2-го порядка перекрывают междендритное пространства и тем самым препятствуют подтоку расплава.

Применение аддитивной технологии позволяет избежать дефектов, свойственных литьевому производству. А применение именно проволочной аддитивной технологии позволяет избежать дефектов, свойственных порошковому подходу. Не смотря на данные преимущества, в современной литературе недостаточно рассмотрены особенности формирования дефектов в жаропрочных сплавах, полученных методом проволочной электронно-лучевой аддитивной технологии.

В данной работе методом аддитивной электронно-лучевой технологии получили однослойные дорожки никелевого сплава, нанесенные на стальную подложку. Исходным материалом служили прутки суперсплава ЖС6У и подложка в виде листового проката из аустенитной стали 12Х18Н9Т с водяным охлаждением. Образцы получали на установке, описанной в работе [4]. В ходе выполнения работы были получены четыре образца. Ток пучка электронов и скорость перемещения рабочего стола (скорость печати) были варьируемыми параметрами электронно-лучевого аддитивного процесса (см. Таблицу 1).

Полученные изделия характеризуются такими макродефектами как, отслоение нанесенного материала от подложки (Рис. 1-а), растрескивание и пористость в области интенсивного перемешивания стали с никелевым сплавом (Рис. 1-б), наличие трещин на границах колоний дендритов (Рис. 1-в). Отслоение нанесенного материала от подложки вероятнее всего происходит из-за деформаций, вызванных различием коэффициентов

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

температурного расширения. Растрескивание по границам колоний дендритов может происходить по нескольким причинам: в следствии межкристаллитного окисления, вызванного наличием большеугловых границ; из-за закупоривания междендритного пространства карбидами, откуда в процессе кристаллизации развиваются трещины; различием скорости роста колоний дендритов с разными кристаллографическими ориентациями. Появление трещин и пор в области активного перемешивания стали с никелевым сплавом трудно поддается интерпретации, т.к. необходимо учитывать процессы образование дефектов не только отдельно взятых материалов, но и их взаимного влияние.

Таблица 1. Параметры электронно-лучевого аддитивного процесса

Маркировка образца	Ток пучка I, мА	Скорость перемещения стола, мм/мин
1	40	150
2	40-60	50
3	60	50
4	53-60	100

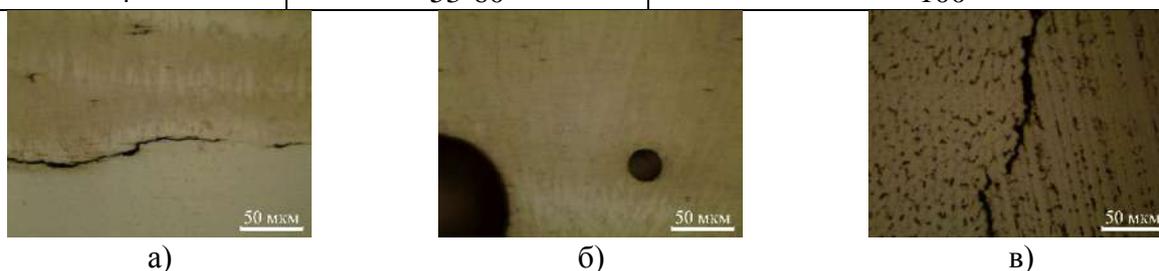


Рис. 1. Дефекты в никелевом сплаве, полученном методом электронно-лучевой аддитивной технологии

В исследуемом материале не было обнаружено фреклов, а расстояние между осями дендритов первого порядка не превышало 20 мкм, что говорит о высоком значении скорости охлаждения. Блочная структура, характерная для литых изделий, не выражена в материале, полученном методом электронно-лучевой аддитивной технологии. И можно предположить, что присутствие аксиальных и азимутальных разориентировок колоний дендритов минимально. В силу того, что наплавочный материал подавался в виде прутков, а не порошка, в нем не обнаружено усадочных пор, характерных для порошковых аддитивных технологий. По этой же причине нет и гомогенизационных пор, и, следовательно, нет необходимости проводить горячее изостатическое прессование.

1. Епишин А.И. Структура, анизотропия физико-механических свойств и механизмы высокотемпературной ползучести монокристаллов жаропрочных никелевых сплавов. // дис. на соискание уч. ст. д.ф.-м.н. Москва. 2007.
2. Шалин Р.Е., Светлов И.Л., Качанов Е.Б. и др. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов // М.: Машиностроение. 1997. С. 336
3. Epishin A., Brückner U., Portella P. D., Link T. Influence of Small Rhenium Additions on the Lattice Spacing of Nickel Solid Solution // Scripta mater. 2003. V. 48. P. 455-459.
4. Kalashnikova T. A., Khoroshko E. S., Chumaevskii A. V., and. Filippov A. V. Surface morphology of 321 stainless steel obtained by electron-beam wire-feed additive manufacturing technology // AIP: Conference Proceedings. 2018. V. 2051, 020114.

DOI: 10.17223/9785946218412/330

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТИ ТОНКОСТЕННЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ
КОНСТРУКЦИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ АДДИТИВНО-СУБТРАКТИВНОГО
ПРОИЗВОДСТВА**

Филиппов А.В., Шамарин Н.Н., Утяганова В., Рубцов В.Е.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Производство алюминиевых тонкостенных элементов изделий является материалоемкой и трудоёмкой задачей. Одним из возможных вариантов повышения эффективности производства тонкостенных элементов конструкция является применение аддитивных технологий. Однако, на сегодняшний день существенным недостатком аддитивного производства является низкое качество поверхности и невысокая геометрическая точность изделий. Для устранения этого недостатка предлагается совместить существующие субтрактивные технологии (фрезерование и электроискровая резка) с аддитивными. Такая гибридная технология позволит получить тонкостенные элементы с высокими показателями качества поверхности, геометрической точности формы при существенном снижении материалоемкости производства. В тоже время, следует тщательно подойти к выбору технологического решения с целью рационального совмещения операций субтрактивного и аддитивного производства. Электронно-лучевая технология 3D-печати характеризуется высокой производительностью. При печати изделия локальная область материала и филамента подвергается высокоэнергетическому воздействию, за счет чего происходит существенный нагрев и плавление материала. В случае нерационального выбора режимов печати может происходить значительное выгорание легких легирующих элементов, содержащихся в алюминиевых сплавах. Также существенное влияние на качество изделия оказывает конфигурация подложки, на которой формируется тонкостенный элемент. Наиболее важными параметрами выбора подложки являются ее материал и геометрическая форма, поскольку они определяют условия теплоотвода от тонкостенного элемента в условиях 3D-печати в вакууме.

В связи с вышесказанным, целью работы является исследование механическую прочность материала, напечатанного на разных видах подложек, представляющих типовые решения при производстве изделий с тонкостенными элементами.

Изготовление тонкостенных элементов осуществлялось на установке электронно-лучевой 3D-печати с использованием проволоки из сплава АМг5. После печати стенки высотой ~20 мм и толщиной 7 мм производилась её механическая обработка методами фрезерования и электроискровой резки. Затем осуществлялась повторная 3D-печать до достижения общей высоты стенки ~40 мм. Также были изготовлены элементы стенок толщиной 5 мм и высотой 20 из проката сплава АМг5, на которые без дополнительной обработки наносили слой АМг5 методом электронно-лучевой 3D-печати до достижения высоты стенки ~40 мм. Таким образом было сформировано три варианта тонких стенок, обеспечивающих возможность исследования их прочности при комбинации различных технологических решений.

В результате исследований структуры методами оптической металлографии и растровой электронной микроскопии не выявлено существенной пористости в образцах. Исследование механических свойств указывает на достаточно высокую прочность всех образцов. Снижение прочности выявлено в случае печати при высоких значениях тока, что обусловлено выгоранием легирующих элементов и образования пористости на границе подложка/напечатанное изделие. При выборе оптимального значения режимов печати достигается предел прочности ~262 МПа.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/331

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРОЗИОННОЙ СТОЙКОСТИ НАПЕЧАТАННОГО
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВЫМ МЕТОДОМ СПЛАВА АМг5**

Филиппов А.В., Шамарин Н.Н., Утяганова В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Сплав АМг5 является распространенным конструкционным материалом и применяется в машиностроении, судостроении, авиации и ракетнокосмической технике. При изготовлении элементов летательных аппаратов коэффициент использования материала составляет от 0,5 до 0,1, что указывает на высокую материалоемкость производства. При этом применение традиционных технологий сварки и наплавки электродуговыми методами является не эффективным. Одной из причин является резкое снижение коррозионной стойкости сплавов системы Al-Mg в области сварного соединения. Возможным путем снижения материалоемкости является применение современных технологий аддитивного производства. В контексте сохранения механических свойств и коррозионной стойкости наиболее перспективным методом является электронно-лучевая аддитивная технология. Поскольку процесс осуществляется в вакуумной камере, постольку снижается вероятность окисления межслоевых границ. Также снижается неоднородность тепловложения, что способствует получению материала с более однородным распределением интерметаллидных частиц. Стандартные коррозионные испытания проводятся путем погружения образцов в раствор соли NaCl и выдержкой в течении 90 дней. Применение современных электрохимических методов является более эффективным, поскольку позволяет значительно экономить время на проведение коррозионных испытаний. Одним из таких методов является электрохимическая импедансная спектроскопия.

В связи с вышесказанным, целью работы является исследование коррозионной стойкости сплава АМг5, полученного электронно-лучевой печатью, с применением метода электрохимической импедансной спектроскопии

Изготовление образцов сплава АМг5 осуществлялось на установке электронно-лучевой 3D-печати из алюминиевой проволоки содержащей 5% магния. После формирования напечатанных образцов проводились структурные исследования методами оптической металлографии и растровой электронной микроскопии. Анализ химического состава интерметаллидов и распределения магния по образцу осуществлялось методом энергодисперсионного анализа. Электрохимическое исследование коррозионной стойкости осуществлялось с применением потенциостата Electrochemical Instruments с приставкой для импедансной спектроскопии. Испытания проводились при комнатной температуре. В качестве электрода сравнения использовался Ag/AgCl электрод, в качестве рабочего электрода использовались образцы сплава АМг5 с активной областью размером 1 см², в качестве контр электрода использовался графитовый стержень. В качестве коррозионной среды использовался раствор 0,6М NaCl. Предварительно в течении одного часа образец выдерживался в коррозионной среде. В течении этого времени регистрировался потенциал разомкнутой цепи. Затем осуществлялось измерение электрохимического импеданса в диапазоне частот от 100кГц до 0,01 Гц, амплитуда напряжения составляла 10мВ относительно потенциала разомкнутой цепи.

Результаты указывают на равномерное распределение интерметаллидов β-фазы (системы MgAl) по напечатанному образцу. Установлено, что изменение тепловложения ведет к изменению содержания магния, что может быть вызвано небольшим выгоранием легирующих элементов в результате слишком интенсивного энергетического воздействия. В результаты коррозионных испытаний установлено, что при электрохимических испытаниях основным механизмом коррозии является питтинг.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/332

**ВЫБОР СМАЗОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ВОЛОЧЕНИЯ ФИЛАМЕНТОВ ИЗ
СПЛАВА 55Ni-10W-9,5Co-8,5Cr, ПРИМЕНЯЕМЫХ В АДДИТИВНОЙ ЭЛЕКТРОННО-
ЛУЧЕВОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Попелюх А.И., Тюрин А.Г., Руктуев А.А., Корниенко Е.Е., Рашковец М.В.
Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

На основе оценки триботехнических свойств проведен выбор смазочного материала для изготовления металлических филаментов из сплава 55Ni-10W-9,5Co-8,5Cr (проволока, прутки), применяемых для высокопроизводительного аддитивного производства с использованием мультитручковой электронно-лучевой технологии.

Аддитивная технология высокопроизводительного мультитручкового электронно-лучевого производства основана на принципе одновременной подачи в рабочую область электронного луча и исходного материала в виде металлических филаментов (проволока, прутки). Одними из наиболее перспективных материалов в аддитивном производстве являются жаропрочные никелевые сплавы, широко применяемые в производстве ответственных деталей газотурбинных двигателей в самолето- и ракетостроении [1]. Сплав системы 55Ni-10W-9.5Co-8.5Cr, являющийся аналогом Inconel 625, обладает высокой прочностью и усталостной долговечностью при повышенных температурах, высокой стойкостью к горячей коррозии, износостойкостью и хорошей свариваемостью [2-3]. Один из прогрессивных способов получения цилиндрических филаментов малого диаметра из сплава системы 55Ni-10W-9.5Co-8.5Cr заключается в пластической деформации металла при его волочении через твердосплавные фильеры. При данном типе производственного процесса правильный выбор смазочного материала играет ключевую роль.

Испытания по оценке зависимости коэффициента трения от удельной нагрузки на пару трения при смазывании различными проводили на машине трения ИИ5018. Скорость вращения диска составляла 150, 300 и 700 об/мин, что соответствует скорости волочения проволоки 23,5; 47,1; и 109,9 м/ мин. Нагрузка на колодку изменялась в диапазоне от 100 до 700 Н. Время испытания каждой пары при различных условиях составляло 5 минут

Предварительно тип смазочных материалов был выбран исходя из данных литературных источников [4, 5]. Были использованы следующие смазочные материалы: минеральное масло Лукойл 10W-40, экспериментальная смазка РГ 25 (экспериментальный смазочный материал на основе минерального масла с добавлением углеродных наночастиц), консистентная литиевая смазка марки «Литол 24», воск пчелиный, а также смеси из масла и технической серы, «Литол 24» и графита.

Величина коэффициента сухого трения пары «сплав ВК15 – сплав 55Ni-10W-9,5Co-8,5Cr» находится в диапазоне 0,32 - 0,37, при этом на поверхности трения никелевого сплава наблюдаются глубокие каверны, возникшие в результате процессов схватывания с материалом индентора с последующим вырывом значительных объемов материала.

Применение смазочных материалов любого типа в 1,5 – 2 раза снижает показатели коэффициента трения и уменьшает повреждаемость поверхности филамента. В исследуемом диапазоне нагрузок наилучшие триботехнические свойства пары трения зафиксированы при использовании минерального масла, модифицированного 10 % технической серы (рис. 1 г). Коэффициент трения в этом случае составляет 0,13, что почти в два раза меньше по сравнению с условиями сухого трения (коэффициент 0,37), при этом величина шероховатости поверхности изнашивания меньше в 2,3 раза: 1,119 мкм по сравнению с 2,563 мкм.

Установлено, что при значительном силовом воздействии на пару трения коэффициент трения существенно не изменяется, что позволяет деформировать проволоку с большими степенями пластической деформации и малым количеством технологических проходов. Низким коэффициентом трения 0,14 - 0,19 пара трения «сплав ВК15 – сплав 55Ni-10W-9,5Co-8,5Cr» обладает при смазывании чистым (без добавок) минеральным маслом и при использовании смазочных материалов на основе минерального масла, а так же

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

экспериментальной смазки РГ 25. В то же время использование консистентных смазочных материалов, в том числе содержащих графит, рекомендуемых литературными источниками [4, 5] и позволяющих проводить волочение при различной пространственной ориентации проволоки, не показало положительных результатов.

Интенсивно протекающие процессы схватывания с материалом диска, приводящие к повреждению поверхности колодки не позволяют рекомендовать использование смазочных материалов на основе «Литол 24» и пчелиного воска при волочении никелевой проволоки (рис. 1 б, в).

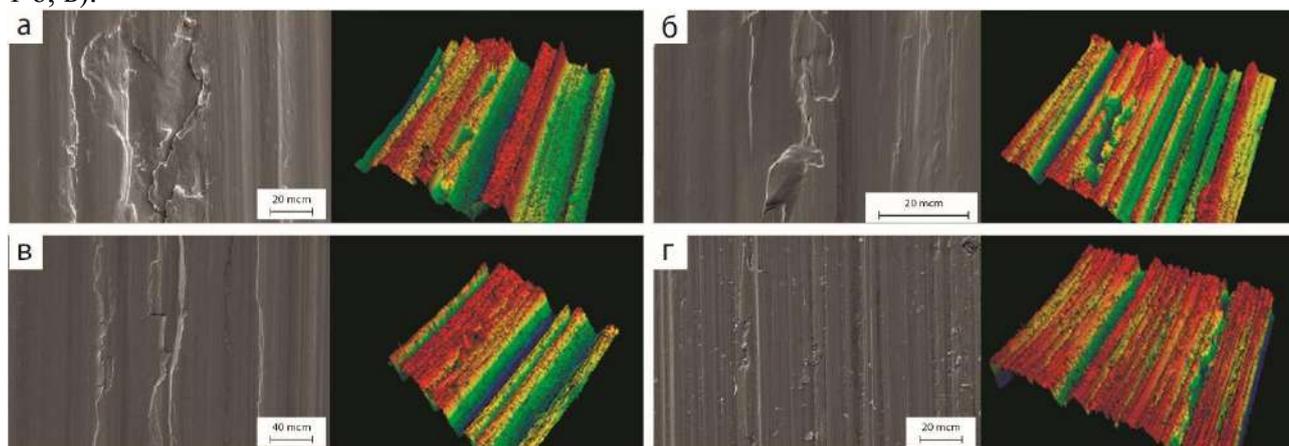


Рис. 1. Поверхность изнашивания колодки из сплава 55Ni-10W-9.5Co-8.5Cr и трехмерная модель шероховатости поверхности при использовании различных смазочных материалов: а) без смазочного материала; б) воск; в) «Литол 24»; г) минеральное масло с добавлением технической серы.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что наилучшими триботехническими свойствами в исследуемом диапазоне нагрузок пара трения «сплав ВК15 – Сплав 55Ni-10W-9,5Co-8,5Cr» обладает при смазывании минеральным маслом с добавлением технической серы. В этом случае коэффициент трения находится в диапазоне 0,15 – 0,16 при величине нормальной нагрузки 500 – 700 Н. Шероховатость поверхности колодки минимальна и составляет 1.199 Ra. Низким коэффициентом трения 0,14 – 0,19 обладают никелевые сплавы так же при смазывании минеральным маслом.

Работы выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013).

1. Kolachev VA, Elagin VI, Livanov VA. Metallurgy and heat treatment of non-ferrous metals and alloys // Textbook for Universities. 3rd Ed. M.: MISiS, 1999. P. 416.
2. Chester Thomas Sims, N. S. Stoloff, William C. Hagel. The Superalloys // Wiley, 1987. – 615 с.
3. Логунов А. В., Шмотин Ю. Н. Современные жаропрочные никелевые сплавы для дисков газовых турбин // Москва. Наука и технология, 2013. – 256 с.
4. Горловский М.Б., Меркачев В.Н. Справочник волочильщика проволоки. М.: Metallurgy, 1993. 335 с.
5. Перлин И.Л., Ерманок М.З. // Теория волочения. М.: Metallurgy, 1971. 448с.

DOI: 10.17223/9785946218412/333

**ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ ДОЭВТЕКТИЧЕСКОГО
СИЛУМИНА МАРКИ АК7ч**

Казанцева Л.А., Курзина И.А.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск

Механические свойства алюминиевых сплавов зависят от химического состава, микроструктуры и способа изготовления сплава. Алюминиевые сплавы (силумины) широко используются в промышленности благодаря легкому весу, низкой плотности, хорошей литейной способности и коррозионной стойкости.

Важными характеристиками алюминиевых сплавов, определяющими их область применения, являются литейные и механические свойства. Свойства сплава также зависят от кинетики затвердевания и состава соединений вторичной фазы. Для обеспечения высокого уровня этих свойств необходимо улучшить микроструктуру сплавов, а именно, измельчить зерно α -фазы с одновременным упрочнением границ раздела фаз модифицирующими добавками. Измельчение первичной фазы кремния, входящего в состав сплава, также играет ключевую роль в улучшении механических свойств. Известно, что часто используемыми характеристиками количественных показателей механических свойств металлических материалов являются предел текучести и деформационное упрочнение [1]. Основными факторами определения прочности металлических материалов являются следующие: дефектная структура зерна, внутренние напряжения и источники дислокаций.

В настоящей работе представлены экспериментальные результаты по исследованию структуры и фазового состава поверхности сплава Al-Si в области эвтектики. Сплав изучался в исходном состоянии и после модификации оксидами тугоплавких металлов.

Современными методами материаловедения выполнены исследования фазового состава и состояние дефектной структуры поверхностного слоя Al-Si сплава. Структура сплава АК7ч в исходном состоянии и после модификации представлена зернами твердого раствора на основе алюминия, эвтектикой и включениями кремния. Для исследования дефектной структуры методом электроискровой резки вырезали пластинки, расположенные в области эвтектики, толщиной 0.1 мкм. Фольги для просмотра в электронном микроскопе готовили электрополировкой. Состояние дефектной структуры анализировали методом просвечивающей электронной дифракционной микроскопии на тонких фольгах с помощью микроскопов «ЭМ-125» и «JEM-2100F» с приставкой «JEOL» для энергодисперсионного спектрального микроанализа.

В работе определены скалярная и избыточная плотность дислокаций, а также внутренние напряжения, создаваемые скалярной и избыточной плотностью дислокаций до и после модификации. Средняя скалярная плотность дислокаций определялась по известной методике методом секущей [2], избыточная плотность дислокаций и внутренние напряжения – согласно [3].

Установлено, что модификация приводит к увеличению всех параметров тонкой структуры. Кроме того, модификация приводит к упругому искажению кристаллической решетки матрицы сплава.

1. Приходько, В.М. Металлофизические основы разработки упрочняющих технологий / В.М. Приходько, Л.Г. Петрова, О.В. Чудина. – М.: Машиностроение, 2003. – 384 с.
2. Хирш П., Хови А., Николсон Р.И. и др. Электронная микроскопия тонких кристаллов. –М.: Мир, –1968. 574 с.
3. Конева Н.А., Козлов Э.В. Закономерности субструктурного упрочнения // Изв. вузов. Физика. – 1991. – Т. 34, № 3. – С. 56-70.

DOI: 10.17223/9785946218412/334

**ТОЧНОСТЬ ПОСТРОЕНИЯ ИЗДЕЛИЙ ИЗ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ
АДДИТИВНЫМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВЫМ МЕТОДОМ**

¹Калашников К.Н., ¹Осипович К.С., ¹Калашникова Т.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
sso.spektr.asu@gmail.com, osipovich_k@mail.ru, gelombang@ispms.ru*

В настоящее время аддитивные технологии, ранее известные лишь как способ 3D-печати изделий различной формы и размеров из пластика, все более прочно укрепляются в современной металлургии. Для получения металлических изделий методами 3D-печати уже разработаны различные виды специализированного оборудования для аддитивных технологий. Существует достаточно много самостоятельных аддитивных методов, имеющих свои положительные и отрицательные стороны. Классифицировать данные технологии можно на основе используемых источников излучения или на основе используемых материалов. В первом случае методы подразделяются на лазерные, электронно-лучевые и дуговые. Лазерные технологии обеспечивают очень высокую мощность излучения в процессе печати, что позволяет обеспечить высокую скорость производства. Электронно-лучевые технологии применяются исключительно в условиях вакуума, но при этом имеют преимущество перед лазерными, поскольку имеют более низкую стоимость и также обеспечивают высокую скорость печати. Во втором случае методы подразделяются на порошковые и проволочные. Порошковые методы аддитивного производства металлических изделий служат для получения в основном малогабаритных изделий, за счет чего к ним предъявляются очень высокие требования к точности построения [1]. Обычно детали, полученные порошковыми методами, являются пористыми, что позволило использовать эти технологии в медицинской области для изготовления имплантатов. При этом порошковые методы можно отнести как к лазерным (например, SLM), так и электронно-лучевым технологиям (EBM). Что касается проволочных технологий, то они могут быть как лазерными (DLD) и электронно-лучевыми (EBAM), так и дуговыми (WAAM) [2]. Обычно, к изделиям, полученным такими методами, не предъявляют серьезных требований к точности построения, поскольку изделия выращиваются в основном крупногабаритные, однако при этом должна быть соблюдена необходимая форма детали. В противном случае несоблюдение необходимой точности построения приведет к лишним затратам материала. Из этого следует, что необходимо исследовать факторы, влияющие на правильность построения деталей. Таким образом, в представленной работе была поставлена цель исследовать точность построения изделий из нержавеющей стали 12X18H9T, полученных методом электронно-лучевого проволочного аддитивного производства.

Для достижения поставленной цели был изготовлен ряд образцов в форме стенок высотой от 10 до 30 мм и длиной от 50 до 100 мм. Образцы были получены в Лаборатории Контроля Качества Материалов и Конструкций ИФПМ СО РАН на специальном оборудовании для электронно-лучевого аддитивного производства. Из полученных образцов на электроискровом станке вырезались темплеты для металлографических исследований. Исследования темплетов проводились на оптическом микроскопе Альтами MET-1С.

Исследования показали, что на точность построения изделий влияет температурный режим, определяемый мощностью электронного пучка, геометрия подачи проволоки и траектория печати образцов. Было выявлено, что при неоптимальном подборе мощности электронного пучка толщина формируемого изделия варьируется в зависимости от участка. Так в зоне, граничащей с подложкой, за счет быстрого охлаждения формируются тонкие слои материала высотой 1 мм. При удалении от подложки охлаждение оказывается недостаточным, и ширина и высота слоев изменяются. В итоге стенка уширяется, а фактическая высота становится значительно меньше заданной. Такой недостаток устраним за счет увеличения мощности пучка при печати первого слоя и дальнейшем его уменьшении при росте стенки.

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

Так же положительно сказывается увеличение плотности пучка за счет изменения диаметра развертки.

Влияние геометрии подачи проволоки и стратегии печати оказывает влияние на построение заданной формы. Так, при слишком остром угле подачи проволоки наблюдается отклонение стенки от вертикали. Влияние стратегии печати заключается в следующем: при нанесении слоев материала в одном направлении происходит неравномерное построение стенки по длине, поскольку происходит перенос металла к ранее нагретой зоне, в итоге высота стенки на начальном участке выше, чем на конечном. При разнонаправленной стратегии печати, когда направление печати изменяется от слоя к слою, данный эффект не наблюдается.

Таким образом, при выполнении данной работы было выявлено, что на точность получаемых электронно-лучевым проволочным методом изделий значительное влияние оказывают как геометрические параметры, так и параметры электронного пучка. При неправильно подобранных режимах не удастся достичь заданной формы изделия. Из этого следует, что подбор параметров процесса электронно-лучевого аддитивного производства образцов из нержавеющей стали 12Х18Н9Т должен заключаться не только в подборе значений ускоряющего напряжения, тока пучка и типа развертки, но и в выборе оптимальной стратегии печати и геометрии подачи проволоки.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Sing S.L., An J., Yeong W.Y. and Wiria F. Laser and electron-beam powder-bed additive manufacturing of metallic implants: A review on processes, materials and designs // *Journal of orthopaedic research: official publication of the Orthopaedic Research Society*. 2013. № 34(3). pp. 369–385.
2. Ding D., Pan Z., Cuiuri D. [et al.] Wire-feed additive manufacturing of metal components: technologies, developments and future interests // *Int J Adv Manuf Technol*. 2015. 81. pp. 465–481.

DOI: 10.17223/9785946218412/335

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТАЛЛОКЕРАМИЧЕСКИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ
МАТЕРИАЛОВ ПОЛУЧАЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ЛАЗЕРНОЙ НАПЛАВКИ**

Гольшев А.А., Филиппов А.А.

*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск*

Введение. Аддитивные технологии (АТ) широко применяются во многих отраслях промышленности и продолжают развиваться. Существует много разновидностей АТ. В данной работе рассматривается метод селективного лазерного плавления SLM (Selective laser melting). С помощью аддитивных технологий возможно путем послойного наращивания материала изготовление изделий различной формы и конфигураций. Для увеличения характеристик изделий используют металломатричные композитные покрытия, состоящие из смеси порошков различных металлов с разными по содержанию и хим. составу керамики [1-3]. При лазерной наплавке порошковой смеси методом АТ возможно образование различных дефектов, таких как трещины, поры и т.д., что снижает механические свойства изделий. К настоящему времени не разработаны методы определения оптимальных параметров наплавки, которые обеспечивали бы низкую шероховатость, монолитность и однородность структуры. Поэтому поиск оптимальных комбинаций параметров (мощности лазерного излучения, частоты импульсов, скорости сканирования, шага сканирования, размера пятна и других) для данного материала или порошка производится эмпирически.

Целью работы является исследование влияния параметров лазерного излучения на форму и характеристики наплавленных металлокерамических треков. Основная задача – проведение оптимизации лазерной наплавки для получения монолитной наплавленной структуры с минимальной шероховатостью. Отметим, что метод оптимизации хорошо себя зарекомендовал при исследовании процесса лазерной резки [4].

Методы и результаты. В работе исследовалась лазерная наплавка на базе SLM метода. Металлокерамическая порошковая смесь WC – NiCrBSi наплавлялась на подложку из нержавеющей стали (12Х18Н10Т) с размерами 50х50х5 мм используя излучение СО₂-лазера с длиной волны 10.6 мкм. Толщина нанесенного слоя порошковой смеси составляла 400 мкм.

В работе была проведена оптимизация лазерной наплавки для получения качественных единичных треков. На рис. 1 представлена фотография подложки с наплавленными треками при разных режимах. В процессе оптимизации варьировались следующие параметра: скорость движения луча V , мощность излучения W и параметры фокусировки F , частота импульсов.



Рис. 1. Фотография образца с единичными треками при разных режимах наплавки

Наплавленные единичные треки исследовались на оптическом конфокальном микроскопе Olympus LEXT 3000. В результате были сформированы 3D поверхности треков, с помощью которых, были определены значения высоты, ширины и шероховатости наплавленных дорожек см. рис. 2.

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

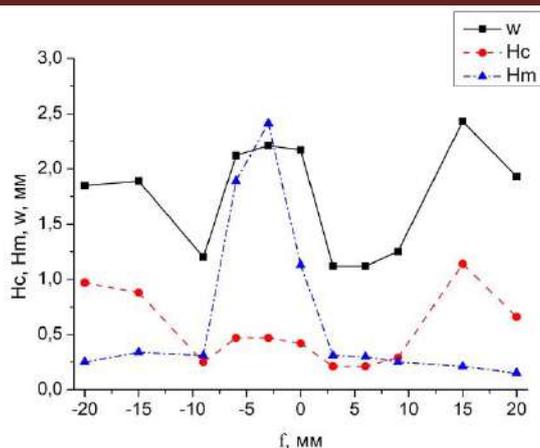


Рис. 2. Влияние положения фокуса на ширину w , высоту наплава H_c и глубину проплава H_m одиночного валика

Особое внимание было уделено измерению механических характеристик формируемых металлокерамических структур. Измерения микротвердости проводились на микротвердомере Wilson Hardness Group Tukon1102 по методу Виккерса.

Заключение. В работе проведена оптимизация процесса лазерной наплавки порошковой смеси на основе Ni и WC с целью получения единичного трека с минимальной шероховатостью в отсутствие пор. Определены оптимальные условия формирования единичных треков. Исследовано влияние микротвердости от параметров лазерного воздействия.

Благодарность. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Новосибирской области в рамках научного проекта № 19-48-543004 р_мол_а «Разработка научных основ создания многоуровневых металлокерамических структур, используя импульсно-периодическое лазерное излучение в аддитивных технологиях».

1. Davydova A., Domashenkov A., Sova A., et al. Selective laser melting of boron carbide particles coated by a cobalt-based metal layer // J. Materials Process. Technol. 2016. Vol. 229. P.361–366.
2. Гольшев А.А., Оришич А.М. Исследование влияния режимов фокусировки лазерного излучения на геометрические и механические свойства металлокерамических треков // Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты). 2019. Т. 21. № 1. С. 82-92.
3. Гольшев А.А., Филиппов А.А., Ряшин Н.С. Исследование микроструктуры формируемых металлокерамических покрытий // В книге: Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии Тезисы докладов XII Всероссийской конференции молодых ученых. Под редакцией В.В. Козлова. 2018. С. 49-50.
4. Фомин В.М., Гольшев А.А., Оришич А.М., Шулятьев В.Б. Энергетика высококачественной резки стали волоконным и CO₂-лазерами// Прикладная механика и техническая физика. 2017. Т. 58. № 2 (342). С. 212-220.

DOI: 10.17223/9785946218412/336

**ОСОБЕННОСТИ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СУПЕРСПЛАВА НА
ОСНОВЕ НИКЕЛЯ В ПРОЦЕССЕ ЛОКАЛЬНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ**

Фортуна С.В., Гурьянов Д.А., Калашников К.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Суперсплавы (жаропрочные сплавы на основе никеля) создавались и используются для изготовления методом литья (в том числе литья с направленной кристаллизацией) лопаток и других деталей горячих трактов современных газотурбинных двигателей авиационного и энергетического назначения [1]. При этом наилучшими эксплуатационными характеристиками обладают лопатки турбин с направлено кристаллизованной монокристаллической микроструктурой [1]. Известные на настоящее время технологии литья с направленной кристаллизацией являются чрезвычайно ресурсоемкими. Как в плане образования большой доли фактически невозвратных, или трудно регенерируемых, отходов очень дорогостоящих материалов, так и по трудоемкости с множеством технологических переходов, сложности оборудования и т.п.

В ближайшей перспективе развитие потенциальных возможностей интенсивно развивающихся аддитивных технологий возможно позволит свести технологию лопаток турбореактивных двигателей с монокристаллической микроструктурой к одной – двум операциям. И в этом направлении уже имеются ощутимые достижения. Например, авторы недавней работы [2] добились эпитаксиального послойного роста суперсплава Inconel 718 на подложке из направленно кристаллизованного умеренно легированного суперсплава на основе никеля в процессе аддитивной лазерной технологии из порошкового материала (E-LMD). Развитие результатов этого исследования в производство позволит производить ремонт изношенных или поврежденных лопаток турбореактивных двигателей с монокристаллической микроструктурой.

Анализ результатов исследований, проведенных в коллективе авторов настоящей работы, показал, что в процессе электронно-лучевой аддитивной технологии (3-D печати) из филаментов возможно формирование изделий из суперсплава на основе никеля с направленной столбчатой микроструктурой. При этом направленная кристаллизация реализуется исключительно вдоль направления градиента температур, т.е. нормально к плоскости поверхности охлаждаемой подложки в виде листового проката из аустенитной стали 12X18H9T. А преимущественная ориентация ГЦК кристаллических решеток γ - и γ^2 -фаз, являющихся основой материала формируемого изделия, вдоль нормали к поверхности подложки соответствует кристаллографическому направлению типа $\langle 001 \rangle$.

Отметим, что реализация направленной кристаллизации с необходимой кристаллографической ориентацией материала суперсплава на подложке из относительно доступного материала выгодно отличает аддитивный метод электронно-лучевой аддитивной технологии (3-D печати) из филаментов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Каблов Е.Н., Толорайя В.Н., Демонис И.М., Орехов Н.Г. Направленная кристаллизация жаропрочных никелевых сплавов // Технология легких сплавов. 2007. № 2. С. 60-70.
2. Lei Zh., Lu N., Yu X. Epitaxy and new stray grain formation mechanism during epitaxial laser melting deposition of Inconel 718 on directionally solidified nickel-based superalloys // Journal of Manufacturing Processes. 2019. V. 42. P. 11–19.

DOI: 10.17223/9785946218412/337

**МИКРОСТРУКТУРА ОБРАЗЦОВ ИЗ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ МАРКИ 12Х18Н9Т,
ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ АДДИТИВНОЙ
МЕТАЛЛУРГИИ**

Осипович К.С., Калашников К.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Процесс аддитивного производства изделий с использованием проволоки относится к методу электронно-лучевой 3D-печати. Для изучения воздействия электронно-лучевой 3D-печати на структуру образца в качестве исследуемого материала использовалась нержавеющая сталь марки 12Х18Н9Т. Коррозионно-стойкая жаропрочная сталь марки 12Х18Н9Т находит широкое применение в изделиях, которые применяются при высоких температурах. Такое направление практического применения обусловлено благодаря ряду важных эксплуатационных свойств: высокая прочность при достаточно высокой пластичности, жаропрочность до температуры 600 °С, коррозионная стойкость.

Для формирования высококачественного изделия методом аддитивного производства необходимо определить допустимые значения параметров электронно-лучевой 3D-печати. Следует отметить, что во время изготовления изделия с материалом происходят рекристаллизационные процессы, соответствующие температурным обработкам. В данной работе исследовано формирование структуры образцов из нержавеющей стали марки 12Х18Н9Т, изготовленных методом электронно-лучевой аддитивной металлургии.

Анализ макроструктуры образца показал, что дефекты по типу трещин не наблюдаются, указывая на полное осаждение слоев. Однако присутствуют микропоры, средний размер которых составляет 60 мкм. При этом усадочные поры, которые формируются при нанесении первых слоев материала и при непосредственном контакте с подложкой, отсутствуют. Общая форма подложки была сохранена, но граница слоев печатаемого изделия и подложки имеет нелинейную форму. При нанесении первых слоев происходит проплавление материала проволоки в подложку на глубину 0.79 мм. Тем самым происходит локальное взаимодействие между подложкой и наплавляемым материалом.

С увеличением количества слоев образца микроструктура изменяется от мелких зерен правильной формы к столбчатым дендритам, рост которых происходит под углом ~30° по отношению к вертикальной оси. В верхнем участке поперечного сечения образца наблюдается сложная гетерогенная дендритная структура, содержащая как относительно крупные столбчатые зерна и субзерна, так и более мелкие зерна почти правильной формы. Размеры столбчатых зерен составляют от 5 до 10 мкм в ширину и от 20 до 250 мкм в длину. Зерна с более равноосной формой имеют размеры порядка 3 ÷ 10 мкм.

Рентгеноструктурный анализ образца из нержавеющей стали марки 12Х18Н9Т также показал различия между верхним и нижним участками. Анализ дифрактограмм показал, что образец, полученный методом электронно-лучевой 3D-печати, находится в двухфазном состоянии – α - и γ -фазы. Причем содержание этих фаз на верхнем и нижнем участке отличаются. В верхнем участке образца содержание α -фазы составляет 23.5 %, остальные 76.5 % – γ -фаза. В нижнем участке образца содержание α -фазы составляет 27.7 %, остальные 72.3 % – γ -фаза. Таким образом, содержание α -фазы в нижней части образца больше, чем в верхней. Это объясняется условиями теплоотвода в вакууме. Тепло от формируемых слоев и области воздействия электронного луча проходит по направлению от верхних слоев изделия к нижним слоям. Следовательно, нижележащие слои подвержены более длительному нагреву, что способствует большей рекристаллизации структуры материала. Кроме того, в нижних слоях образца размер областей когерентного рассеяния больше, чем в верхних, что подтверждает рост размерности структуры и указывает на рекристаллизационный рост зеренной структуры материала.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/338

**МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ СТАЛИ МАРКИ 12X18H9T,
ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ МЕТАЛЛУРГИИ**

Осипович К.С., Калашников К.Н., Гурьянов Д.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Аустенитные нержавеющие стали, в том числе сталь марки 12X18H9T, относятся к конструкционным материалам, предназначенным для применения в оборудовании, рассчитанном для работы при высоких температурах или коррозионном воздействии таком, как котлы, нагреватели и химические реакторы. Подобное применение в промышленности обусловлено благодаря своей высокой коррозионной стойкости, хорошей свариваемости и жаропрочности до температуры 600 ° С. При этом аустенитные нержавеющие стали подвержены коррозионному растрескиванию под напряжением в определенных условиях.

Остаточные внутренние напряжения оказывают негативное влияние на механические свойства готовых изделий. Остаточные растягивающие напряжения возникают в материале в результате различных этапов изготовления компонентов таких, как объемная деформация, обработка поверхности, сварка и т.д. В настоящее время существуют методы изготовления деталей, при которых снижается значение остаточных напряжений.

Изготовление деталей с помощью электронно-лучевой металлургии с использованием проволоки позволяет избежать растрескивания и охрупчивания готового изделия. Это связано с тем, что процесс изготовления деталей протекает в высоком вакууме при повышенных температурах, что позволяет значительно минимизировать остаточные тепловые напряжения. Таким образом, в данной работе показано, что при изготовлении изделий методом электронно-лучевой металлургии с использованием проволоки негативное влияние на механические свойства готовых изделий не наблюдается.

При исследовании макроструктуры образцов нержавеющей стали марки 12X18H9T, изготовленных методом электронно-лучевой аддитивной металлургии, не было выявлено наличия дефектов наплавленного металла по типу пор и трещин. Микроструктура стали представлена в основном литым дендритным строением. Высокая стабильность структуры образцов из аустенитной стали и отсутствие дефектов по типу пор и трещин предполагает наибольшее значение механических свойств.

Для установления точных значений параметров механических свойств, предела прочности $\sigma_{0.2}$, предела текучести σ_b и относительного удлинения δ , были проведены испытания на растяжение в циклах нагрузка/разгрузка. Было установлено, что для образца характерны высокие значения механических свойств, предела прочности $\sigma_{0.2}$ и предела текучести σ_b , 204 МПа и 530 МПа, соответственно. Исходя из начальных данных и размеров образцов после разрушения было получено значение относительного удлинения образца $\delta = 178 \%$.

Таким образом, проведенные исследования образца из аустенитной стали 12X18H9T, изготовленного методом электронно-лучевой аддитивной металлургии, показывают благоприятное влияние метода получения изделий на характеристические параметры механических свойств. При 3D-печати образца тепло индуцировалось на верхнем слое и через него распространялось повторяющимися тепловыми волнами. Таким образом, материал подвергается повторяющимся циклам плавления, отвердевания и отжига. Это позволяло высвобождать внутренние остаточные напряжения и получить высокие значения характеристических параметров механических свойств.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/339

**МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ 3D НАПЕЧАТАННЫХ ОБРАЗЦОВ
ТИТАНОВОГО СПЛАВА Ti-6Al-4V ПУТЕМ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ И
УЛЬТРАЗВУКОВОЙ УДАРНОЙ ОБРАБОТОК**

Синякова Е.А., Панин А.В., Панин С.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

В последние годы изготовление деталей из титанового сплава Ti-6Al-4V методом аддитивного производства достигло значительных успехов, особенно в отношении оптимизации процесса производства и механических свойств полученных изделий. Одной из перспективных технологий получения высокопрочных объемных металлических изделий является селективное лазерное плавление (Selective Laser Melting — SLM), обеспечивающее их формирование путем сплавления металлических порошков лазерным лучом [1]. Данная технология позволяет получать объемные изделия из титанового сплава Ti-6Al-4V со сложной внутренней архитектурой, высокой степенью детализации их элементов и с высокой размерной точностью [2]. Недостатком метода SLM является то, что готовые изделия имеют высокую шероховатость поверхности независимо от параметров печати и толщины образца и, соответственно, требуют механической постобработки перед вводом в эксплуатацию. Кроме того, шероховатая поверхность SLM-образцов оказывает негативное влияние на их механические, технологические и эксплуатационные свойства. Например, как показано в [3], SLM-образцы из титанового сплава Ti-6Al-4V, подвергнутые механической шлифовке и полировке, имеют более высокие прочностные характеристики и пластичность при последующем одноосном растяжении.

В настоящей работе в качестве методов постобработки рассматриваются ультразвуковая ударная обработка, основанная на пластическом деформировании поверхности, и электронно-пучковая обработка, обуславливающая плавление поверхностного слоя и его быструю кристаллизацию. Данные методы не только могут обеспечить снижение шероховатости поверхности SLM образцов, но и увеличить твердость их поверхностного слоя без изменения внутренней структуры самого изделия.

Ультразвуковую обработку поверхностных слоев титанового сплава Ti-6Al-4V проводили на установке И-4/1-2.0 путем возбуждения в обрабатываемом инструменте ультразвуковых колебаний. Амплитуда и частота колебаний рабочей поверхности волновода составляли 15 мкм и 23 кГц, соответственно. Скорость сканирования индентора по поверхности пластины при ультразвуковой обработке составляла по оси x - 1.7 мм/с, по оси y - 4.4 мм/с, шаг сканирования $\sim 0,1$ мкм. Облучение образцов электронным пучком проводили на электронно-пучковой установке «SOLO» (ИСЭ СО РАН) тремя импульсами с длительностью 50 мкс. Плотность энергии пучка была равной $W = 24$ Дж/см², частота следования импульсов составляла 0.3 с⁻¹. Облучение выполняли в атмосфере инертного газа аргона при остаточном давлении 0.02 Па.

Показано, что шероховатость исходных SLM образцов из титанового сплава Ti-6Al-4V обусловлена как наличием на их поверхности частично расплавленных частиц порошка, прикрепленных к поверхности, так и волнистым рельефом, сформированным зонами расплава. Среднеквадратичная шероховатость (R_q) исходных образцов, определенная методом контактной профилометрии, составляет 20 мкм. Как электронно-пучковая, так и ультразвуковая ударная обработки SLM-образцов приводят к снижению шероховатости их поверхности до $R_q = 0,76$ и $R_q = 0,48$ мкм, соответственно. Методом оптической микроскопии и рентгеноструктурного анализа продемонстрировано влияние электронно-пучковой и ультразвуковой ударной обработок на микроструктуру и фазовый состав SLM-образцов. Измерение микротвердости по боковой грани образцов показало, что ультразвуковая ударная обработка приводит к существенному увеличению микротвердости SLM-образцов от 5,3 до 8,5 ГПа, а глубина упрочненного слоя составляет 30 мкм. В случае облучения электронными

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

пучками твердость на поверхности SLM-образцов и глубина модифицированного слоя достигают 10 ГПа и 60 мкм, соответственно.

Работа выполнена в рамках Программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» Министерства науки и высшего образования РФ; Соглашение № 05.583.21.0089, идентификатор проекта RFMEFI58318X0089.

1. Murr L.E., Gaytan S.M., Ramirez D.A., et al. Metal Fabrication by Additive Manufacturing Using Laser and Electron Beam Melting Technologies // *Journal of Materials Science & Technology*. 2012. V. 28. P. 1-14.
2. M. Mazur, M. Leary, Sh. Sun, M. Vcelka, D. Shidid, M. Brandt. Deformation and failure behaviour of Ti-6Al-4V lattice structures manufactured by selective laser melting (SLM) // *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. 2016. V. 84. P. 1391–1411.
3. X. Zhao, Sh. Li, M. Zhang, Y. Liu. Comparison of the microstructures and mechanical properties of Ti-6Al-4V fabricated by selective laser melting and electron beam melting // *Materials & Design*. 2016. V 95. P. 21-31.

DOI: 10.17223/9785946218412/340

ПРИМЕНЕНИЕ ВЫСОКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ПУЧКОВ ЭНЕРГИИ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ АЛЮМИНИДОВ ТИТАНА

Матц О.Э., Рашковец М.В., Чучкова Л.В.

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Одним из целесообразных и экономически выгодных решений восстановления изношенных деталей является формирование прочных и твёрдых покрытий методами аддитивных технологий. Наиболее перспективными методами получения покрытий являются высокоэнергетические технологии. Применение технологий, основанных на концентрации высокой энергии, позволяет за один проход лазера или электронного луча сформировать защитный слой порядка нескольких миллиметров [1]. Важно отметить, что толщина зоны переплава и качество получаемого слоя или покрытия напрямую зависит от параметров используемой технологии.

В данной работе предлагается исследовать влияние вневакуумной электронно-лучевой обработки на формирование защитного слоя, состоящего из алюминидов титана, на поверхности титанового сплава. Основные режимы наплавки представлены в Табл. 1.

Таблица 1. Режимы вневакуумной электронно-лучевой обработки.

Ток пучка, мА	Скорость перемещения столика, мм/с	Частота сканирования луча, Гц
18	10	50

Порошковые смеси, состоящие из химически чистых титана, алюминия, марганца и флюсов (LiF , CaF_2), наносились на подложки из титанового сплава ВТ1-0, затем обрабатывались электронным лучом. В связи с кратковременностью процесса вневакуумной электронно-лучевой обработки и благодаря теплопроводности материалов, основы не перегреваются, что также влияет на ширину зоны термического влияния.

Порошковые смеси были подготовлены таким образом, чтобы сформировался кубический триалюминид титана (TiAl_3 или $\text{TiAl}_{3-x}\text{Mn}_x$). Структура и свойства отмеченного соединения представляют значительный интерес с точки зрения получения покрытий с наивысшим уровнем жаро- и коррозионностойкости на поверхности титана [2].

Проведенные исследования показали, что для образцов системы Ti-Al-Mn при обработке на режимах, приведенных в Табл. 1, формируется ламеллярная структура в наплавленном слое, толщиной порядка 2 мм. Размер ламелей варьируется от 5 до 30 мкм. Кроме того, наблюдается незначительная равномерно распределенная пористость. Следует отметить, что значительных трещин, характерных для тетрагонального триалюминид титана, обнаружено не было. На рис. 1 представлена микроструктура поперечного сечения покрытия Ti-Al-Mn, полученная на растровом электронном микроскопе в режиме обратно-рассеянных электронов.

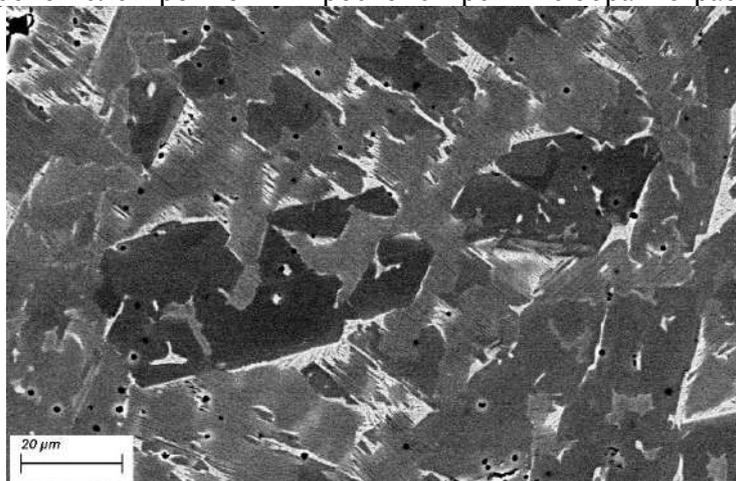


Рис. 1. Микроструктура материалов Ti-Al-Mn, сформированных при вневакуумной электронно-лучевой обработке

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

Были проведены измерения микротвердости покрытий по методу Виккерса с нагрузками на индентор 0,1 кг и 5 кг. Установлено, что среднее значение микротвердости в покрытии составило 570 HV_{0,1}. При измерениях с нагрузкой на индентор 50 Н не было обнаружено трещин.

По результатам исследования могут быть сделаны следующие выводы: технология вневакуумной электронно-лучевой обработки является эффективным решением для формирования алюминидов титана; данный метод способствует формированию более твердых защитных слоев на титановом сплаве ВТ1-0 (модельный). В планах дальнейшего исследования входит оценка фазового состава и ряда свойств алюминидов титана, легированных марганцем.

Работы выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013).

1. D. V. Lazurenko et al. Influence of electron beam treatment regimes on the structure and properties of intermetallic clads obtained on titanium substrates // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 124 (2016) 012128 doi:10.1088/1757-899X/124/1/012128.

2. D. G. Morris, S. Gunter. Ordering, ternary atom location and ageing in L1₂ trialuminide alloys // Acta metall, mater. Vol. 40, No. 11, pp. 3065-3073, 1992.

DOI: 10.17223/9785946218412/341

**ТРЕБОВАНИЯ К ФЕЛАМЕНТАМ ДЛЯ МЕТАЛЛУРГИИ ЛОКАЛЬНЫХ ОБЪЕМОВ
МАТЕРИАЛОВ В АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ**

Буров В.Г.

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск,

Послойное формирование металлических изделий с использованием лазерного или электронного луча открывает широкие возможности создавать изделия с градиентным химическим составом и изменяющейся структурой как на макро-, так и на мезо- и микромасштабном уровнях. Накопленный опыт исследования наплавки композиционных упрочняющих покрытий на изделия из металлических сплавов позволяет определить перспективы и ограничения при синтезе деталей, состоящих из разнородных материалов. В отличие от армированных соединений, являющихся сборочными единицами, изготовленными из разнородных материалов, создаваемые 3D-печатью изделия представляют собой детали, имеющими переменный химический состав и гетерофазную структуру. При синтезе таких деталей важен учет физико-химического взаимодействия разнородных материалов как в отдельных слоях, так и между слоями. Из существующих современных схем 3D-печати металлических изделий для формирования синтеза изделий из разнородных материалов может быть применен метод процесс прямого подвода энергии и материала (*Direct metal deposition*). В качестве источника энергии, обеспечивающего локальное расплавление наплавляемого металла или композиционного материала с металлической матрицей, наиболее перспективно применение луча релятивистских электронов в связи с исключением влияния на степень поглощения энергии оптических свойств используемых материалов. В качестве среды для послойной наплавки допустим только вакуум, исключающий рассеяние электронного луча. Следующее ограничение связано со способом доставки наплавляемого материала в зону нагрева, наиболее эффективным представляется использование прутков и нитей (филаментов) из чистых металлов и сплавов. Порошковые композиции могут быть также применены, но только в виде порошковых проволок, в которых оболочка выполнена из основного матричного материала и заполнена смесью порошков, определяющих свойства формируемого гетерофазного слоя. Каждый из слоев может быть сформирован одновременной наплавкой нескольких нитей с изменением скорости подачи каждой из них в зону плавления, что также позволяет направленно формировать химический состав локальных объемов формируемого изделия.

Химический состав синтезируемой детали определяется требованиями к свойствам их отдельных объемов. Так, например, опыт наплавки твердосплавных вольфрамокобальтовых покрытий на стальные изделия [1], свидетельствует о возможности использования электронного луча для формирования твердого сплава, так как время смачивания карбидных частиц расплавом определяется величиной $\sim 10^{-3}$ с, а время растекания расплава на расстояние 1 мкм составляет $\sim 10^{-2}$ с. Непосредственная наплавка твердосплавной композиции на сталь ограничивается формированием хрупких сложных карбидов в переходной зоне между сталью и твердосплавным слоем. По данным дифференциальной сканирующей калориметрии кристаллы сложных карбидов $(Fe, W, Co)_n C$ образуются в наплавляемом покрытии при твердофазном взаимодействии частиц карбида вольфрама с железом и кобальтом уже при температурах выше 710 °С. Эти карбиды отличаются повышенной хрупкостью и сохраняются в переходной зоне между наплавляемым покрытием и сталью в результате нарушения баланса углерода в наплавляемом покрытии. Наличие сложных карбидов $(Fe, W, Co)_6 C$ в переходной зоне приводит к потере упрочняющих свойств наплавленного слоя. Для исключения образования дефектной структуры рационально формировать барьерный слой между сталью и наплавляемым твердым сплавом, который исключал бы взаимодействие железа основного металла с частицами карбида вольфрама. Наилучшие результаты были получены путем насыщения поверхностного слоя стали бором, сформированный слой позволяет создать между сталью и наплавляемым твердым сплавом борированный слой, ограничивающий

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

взаимодействие железа с частицами карбида вольфрама. Наплавка твердосплавной порошковой смеси на насыщенный бором поверхностный слой стали позволяет получить при наплавке твердого сплава матричное покрытие, содержащее частицы монокарбида вольфрама в матрице, состоящей из эвтектик $\text{Co-Co}_2\text{B}$ и $\text{Fe-Fe}_2\text{B}$. Результаты прочностных испытаний закаленной от $850\text{ }^\circ\text{C}$ и отпущенной при $300\text{ }^\circ\text{C}$ композиции "сталь 45 – покрытие", полученной жидкофазным спеканием порошковой смеси ВК6 на предварительно насыщенной бором стали 45 показали, что покрытие имеет свойства, близкие к свойствам спеченного твердого сплава WC-Co , несмотря на то, что его структура является матричной и не имеет жесткого каркаса из частиц упрочняющей фазы.

Длительный процесс диффузионного насыщения поверхностного слоя стали бором может быть заменен процессом электронно-лучевой наплавки железа с порошком бора [3], что позволяет получать борированные слои различной толщины с равномерной микроструктурой. Таким образом, процесс электронно-лучевой 3D-печати стального изделия с твердосплавными поверхностными слоями может быть выполнен непрерывно путем печати борированных слоев на предварительно сформированный стальной слой и последующей печатью слоев, содержащих частицы монокарбида вольфрама.

Электронный луч как источник нагрева позволяет обеспечить нагрев любых металлов, сплавов и керамических материалов с высоким коэффициентом поглощения энергии [2], а аддитивная послойная наплавка в вакууме минимизирует дефектность структуры в виде пор. Так как значительное количество сплавов и композиционных материалов не может быть изготовлена в виде филаментов, применение порошковых проволок может обеспечить формирование градиентных структур. Это направление металлургии локальных объемов материалов в аддитивных технологиях предъявляет особые требования к составу, структуре и геометрическим характеристикам филаментов:

- плотность порошкового наполнителя в оболочке проволоки не должна быть менее 40...50 % от теоретической плотности;
- оболочка должна быть выполнена из пластичного материала, который формирует матрицу наплавляемого слоя, с целью возможности многократного волочения проволоки до необходимого диаметра;
- размеры частиц порошковой смеси, являющейся наполнителем проволоки, определяется ее сыпучестью и диаметром проволоки;
- использование проволок с замком возможно только при больших диаметрах и крупнозернистом наполнителе;
- оболочка проволоки должна быть выполнена с нахлестом и обладать высокой жесткостью, исключающей ее раскрытие под действием высокотемпературного нагрева, либо оболочка должна быть заварена.

1. Буров, В. Г. Особенности формирования твердосплавных покрытий в процессах жидкофазного спекания [Текст] / В. Г. Буров, А. А. Батаев // Обработка металлов: технология, оборудование, инструменты. – 2004. – № 4 (25). – С. 11–12.
2. Surface-layer formation by melting tungsten-cobalt powder mixtures on steel [Text] / V. G. Burov, V. A. Bataev, S. V. Veselov, Z. B. Bataeva, T. S. Sameishcheva // Russian Engineering Research. – 2012. – Vol. 32, № 1. – P. 95–97.
3. Non-vacuum electron-beam boriding of low-carbon steel [Text] / I. A. Bataev, A. A. Bataev, M. G. Golkovsky, A. M. Teplykh, V. G. Burov, S. V. Veselov // Surface & Coating Technology. – 2012. – Vol. 207. – P. 245–253.

DOI: 10.17223/9785946218412/342

**ПОВЫШЕНИЕ ИЗНОСОСТОЙКОСТИ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ С
ПРИМЕНЕНИЕМ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ
ОБРАБОТКИ**

Чучкова Л.В., Белов А.С., Матц О.Э.

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Аннотация: в работе приведены результаты исследований структуры и износостойкости, которые доказывают эффективность применения аддитивных технологий для повышения триботехнических характеристик титановых сплавов. Показано, что наплавка порошковой смеси системы Cr-B₄C позволяет сформировать покрытия толщиной до 3 мм, и повысить стойкость к изнашиванию в 3,5 раза в сравнении с материалом основы.

В современном машиностроении в зависимости от условий эксплуатации к изделиям предъявляются определенные требования, в том числе рабочие среды и эксплуатационные нагрузки. Существующие конструкционные металлы не всегда удовлетворяют поставленным задачам, в связи с чем формирование новых материалов является необходимым.

Благодаря высокой коррозионной стойкости, удельной прочности и жаропрочности титановые сплавы активно применяются в медицине, самолето- и судостроении [1]. Однако низкие значения стойкости к изнашиванию в различных условиях трения сдерживают повсеместное применение титана и сплавов на его основе в промышленности.

На сегодняшний день аддитивные технологии являются одними из самых передовых и включают в себя такие процессы как напыление, экструзия, наплавка [2]. Применение аддитивной технологии электронно-лучевого оплавления позволяет получать равномерные слои толщиной до 5 мм с широким выбором наплавочных материалов благодаря высокой мощности электронного пучка. Для повышения триботехнических характеристик титановых сплавов применяется упрочнение высокопрочными частицами, в том числе карбидами, боридами и нитридами [3].

В данной работе в качестве материала основы применялись пластины из титанового сплава BT6, размер которых составил 12×50×100 мм. Для повышения износостойкости поверхностных слоев была подобрана наплавочная смесь, состоящая из порошков карбида бора, хрома и фтористых флюсов. Формирование покрытий осуществлялось методом электронно-лучевого оплавления в воздушной среде на ускорителе электронов типа ЭЛВ-6. Технологические режимы, такие как мощность пучка (100 кВт), частота сканирования (50 Гц), диаметр пучка электронов (12 мм) и удельная поверхностная энергия (3,1 кДж/см²) оставались неизменными. Варьируемой величиной стала концентрация исходных порошков карбида бора и хрома в составе наплавочной смеси. Для первого образца она составила 20 вес. % B₄C + 30 вес. % Cr и для второго 30 вес. % B₄C + 20 вес. % Cr.

Определение фазового состава сформированных поверхностно-легированных слоев осуществлялось на дифрактометре высокого разрешения ARLX'TRA в системе θ - θ . Съемка реализовывалась с применением Cu K α излучения в угловом диапазоне от 20 до 80 °. Расшифровка полученных картин дифракции проводилась с применением баз данных PDF-4. Металлографические исследования реализовывались на световом и растровом электронном микроскопах (Carl Zeiss Axio Observer Alm и Carl Zeiss EVO50 XVP). Анализ триботехнических свойств осуществлялся при трении в условиях воздействия закрепленных частиц абразива по ГОСТ 17367-71. В качестве эталонного материала применялся титановый сплав BT6.

Анализ дифракционных картин, полученных с поверхностных слоев образцов показал, что покрытия состоят из карбида и борида титана, карбида хрома, а также α (α')- и β - титана. Формирование мартенситной (α')-фазы титана было предположено вследствие высоких скоростей охлаждения образцов в процессе обработки, однако подтвердить ее присутствие методами рентгенофазового анализа практически невозможно.

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

В результате металлографических исследований было выявлено, что структура первого и второго образцов отличается незначительно. Во всех покрытиях был зафиксирован тонкий слой дендритных частиц карбида хрома, не превышающий в толщину 100 мкм (рисунок 1 а). Наплавка 30 вес. % хрома позволяет получить равномерный дендритный слой по всей поверхности покрытия, в то время как снижение концентрации порошка хрома на 10 вес. % приводит к формированию лишь локальных участков данных частиц. Помимо дендритных кристаллов карбида хрома, в поверхностно-легированных слоях была зафиксирована мелкая эвтектическая фаза, распределенная по границам зерен, вытянутых в направлении отвода тепла (рисунок 1 б). На более высоких разрешениях эвтектика представляет собой кристаллы боридов титана вытянутой игольчатой формы и частицы карбида титана округлой морфологии (рисунок 1 в). Толщина исследуемых покрытий, сформированных электронным пучком составила порядка 3 мм.

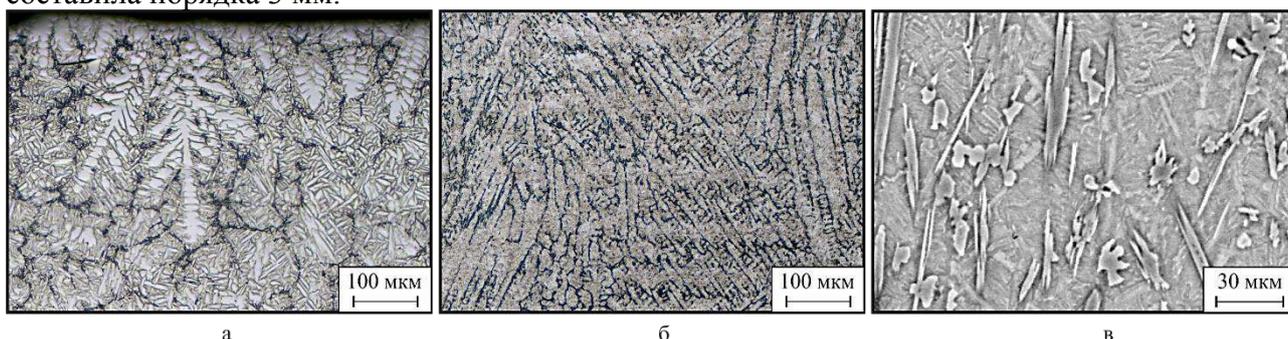


Рисунок 1 – Структура поверхностно-легированных слоев, полученных методом электронно-лучевой обработки в воздушной среде: а, б – световая металлография; в – электронная микроскопия

Триботехнические испытания в условиях воздействия закрепленных частиц абразива показали эффективность упрочнения титановых сплавов электронно-лучевой наплавкой. В результате испытаний было выявлено, что наплавочная смесь, состоящая из 30 вес. % карбида бора и 20 вес. % хрома, позволяет повысить износостойкость титанового сплава ВТ6 в 2,6 раз. Повышение концентрации хрома до 30 вес. % и снижение карбида бора до 20 вес. % значительно влияет на стойкость к изнашиванию сплава ВТ6. Покрытие, полученное при наплавке данной порошковой смеси, в 3,5 раза превышает износостойкость эталонного материала. Такое повышение стойкости к изнашиванию можно объяснить формированием равномерного тонкого слоя карбида хрома, который эффективно снижает изнашивание поверхности в процессе эксплуатации.

В качестве вывода можно отметить, что применение электронно-лучевой наплавки порошковой смеси V_4C_3 -Cr на титановый сплав ВТ6 позволяет сформировать бездефектные покрытия толщиной до 3 мм, состоящее из тонкого слоя дендритных частиц карбида хрома и эвтектики. Кроме того, полученные образцы показали существенное повышение износостойкости материала основы (в 3,5 раза) при трении в условиях воздействия закрепленных частиц абразива.

Работы выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013).

1. Чечулин Б.Б., Ушков С.С., Разуваева И.Н. Титановые сплавы в машиностроении. Санкт-Петербург: Машиностроение, 1977. 248 с.
2. Зленко М.А., Попович А.А., Мутылина И.Н. Аддитивные технологии в машиностроении. Санкт-Петербург: Издательство политехнического университета, 2013. 221 с.
3. Степанова Т.Ю. Технологии поверхностного упрочнения деталей машин. Иваново, 2009. 64 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/343

**ФОРМИРОВАНИЕ НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ ПОКРЫТИЙ МЕТОДАМИ
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ НАПЛАВКИ И ПЛАЗМЕННОГО НАПЫЛЕНИЯ**

Зимоглядова Т.А., Корниенко Е.Е., Дробяз Е.А., Егорова А.С.

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Изготовление деталей с использованием технологий аддитивного производства является перспективным направлением развития современного машиностроения. В качестве прекурсора для 3D печати используют порошки или проволоку. Следует отметить, что выращивание изделий из проволоки более технологично, ввиду пониженной вероятности загрязнения выращиваемого материала кислородом, а также более низкой цены прекурсора [1].

Сплавы на никелевой основе широко применяются в тех случаях, когда от изделия одновременно требуется высокая коррозионная стойкость и жаростойкость. Наиболее часто для аддитивного производства используют никелевые сплавы марок Inconel 718 и Inconel 625. В ряде сплавов дополнительно присутствуют упрочняющие фазы (например, карбиды, бориды или силициды), повышающие твердость и износостойкость материалов. Тем не менее, низкая пластичность этих материалов не позволяет получать длинномерную проволоку, которую затем можно было бы свернуть в бухту, обеспечив, тем самым, загрузку большего количества материала для выращивания по технологии аддитивного производства. Применение порошковой проволоки в качестве материала прекурсора является технологичным решением отмеченной проблемы.

Технология послойного выращивания деталей с применением электронного луча (EBM – electron beam melting) отличается высокой производительностью, возможностью обработки материалов, подвергающихся окислению, минимальными остаточными напряжениями на обрабатываемой детали. Метод наплавки электронным лучом, в классической интерпретации способа, реализуется в среде вакуума. Данная особенность накладывает ряд существенных ограничений на габаритные размеры обрабатываемой детали. Повышение энергии электронов до значений МэВ диапазона (~ 1 – 1,5) решает данную проблему, позволяя вывести электронный луч за пределы вакуумной среды [2].

Цель настоящей работы заключается в изучении структурных особенностей поверхностных слоёв на основе никельсодержащего сплава, сформированных с использованием технологии многопроходной наплавки электронным лучом, выведенным в воздушную атмосферу.

В качестве материала для формирования покрытий использовали промышленный самофлюсующийся порошок на основе никеля марки ПР-Н77Х15С3Р2 (осн. – Ni, 15.1 % Cr, 2 % В, 3.2 % Si, 2.1 % Fe). Выбор данного материала объясняется наличием в составе кремния и бора, являющихся флюсующими компонентами, защищающими наплавляемый слой от окисления. В качестве основного материала использовали пластины из низкоуглеродистой стали 20 (осн. – Fe; 0.21 % С; 0.3 % Si; 0.63 % Mn; 0.15 % Ni; 0.02 % S; 0.015 % P). Наплавка осуществлялась на промышленном ускорителе ЭЛВ-6 в Институте ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН (г. Новосибирск). Наплавка никельсодержащего сплава осуществлялась за 1, 2 и 3 прохода, по следующим режимам: ток пучка – 25 мА, скорость перемещения образца: 15 мм/с, дистанция между выпускающим отверстием и заготовкой – 90 мм.

В качестве сравнения были выбраны образцы с покрытиями из порошка ПР-Н77Х15С3Р2, полученными атмосферным плазменным напылением (АПН). АПН производили на установке «Термоплазма 50-01», в Институте прикладной и теоретической механики СО РАН (г. Новосибирск). Для получения слоев с низкой пористостью применяли оригинальный узел кольцевого ввода порошка. Режимы плазменного напыления: ток дуги – 140 А; напряжение – 265 В, дистанция напыления – 170 мм.

Объектами для структурных исследований и дюротрических испытаний являлись микрошлифы, подготовленные по стандартной методике. Для выявления микроструктуры

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

покрытий использовали травитель на основе HCl, HNO₃ и FeCl₃. Структурные исследования были проведены на оптическом (Axio Observer A1m) и растровом электронном микроскопе (EVO50 XVP), оснащённом микроанализатором EDS X-Act фирмы Carl Zeiss. Дифрактограммы регистрировали в режиме времени $t = 5$ с с шагом $\Delta 2\theta = 0,05^\circ$. Микротвердость структурных составляющих покрытий оценивали на микротвердомере Wolpert Group 402MVD при нагрузке 100 Н. Наличие дефектов по объёму сформированных материалов исследовали с применением метода рентгеновской компьютерной томографии на приборе GE Nanotom M совместно со специалистами Университета прикладных наук г. Ландсхут (Германия).

Покрытия, сформированные методом АПН, состоят из расплавленных в плазменной струе и пластически деформированных частиц. Наплавленный слой, сформированный методом ВЭЛН, характеризуется литым строением. Интенсивный отвод тепла вглубь подложки в процессе наплавки способствует формированию около наплавленного металла зоны термического влияния, толщина которой не превышает 300 мкм. Микроструктура слоёв, сформированных по технологии ВЭЛН за 2 и 3 прохода идентична материалу, сформированному за 1 проход, и отличается лишь толщиной наплавленного слоя.

Метод рентгеновской компьютерной томографии позволяет отследить расположение и протяжённость дефектов по всему объёму исследуемого материала. Результаты исследований не противоречат металлографическим исследованиям – в покрытиях, сформированных методом АПН, в стыках между «сплэтами» присутствуют поры сложной формы. В многослойных материалах, сформированных методом ВЭЛН выявлено наличие трещин. Методом рентгенофазового анализа было установлено, что основными фазами покрытий, полученных при помощи АПН, являются: γ -Ni, Ni₃B, CrB и Cr₇C₃. Анализ рентгенограммы материала, полученного по технологии ВЭЛН, позволил установить наличие γ -Ni, Fe, α -Fe, а также фазы Fe₂B. Присутствие железа в наплавленных слоях объясняется его переходом из материала основы и является негативным фактором, сказывающимся на эксплуатационных характеристиках полученных материалов.

Более глубокие структурные исследования материалов, сформированных с использованием технологий АПН и ВЭЛН были проведены при помощи растровой электронной микроскопии. В плазменных покрытиях установлено наличие твёрдого раствора γ -Ni(Cr, Si, Fe). Также зафиксирована эвтектика Ni-Ni₃B. Материал, сформированный методом ВЭЛН за 1 – 3 прохода, состоит из дендритов γ -Ni, Fe, вытянутых в вертикальном направлении. Определён состав эвтектики, кристаллизующейся в форме розеток: γ -(Ni, Fe)-CrB. Установлено, что уровень микротвердости слоёв, наплавленных методом ВЭЛН, находится в диапазоне 400...450 HV. Микротвердость покрытий, сформированных по технологии АПН, составляет 650...700 HV.

Таким образом установлено, что покрытия, полученные ВЭЛН, имеют литое строение, тогда как плазменные покрытия состоят из оплавленных в плазменной струе, а также пластически деформированных частиц. Рентгенофазовым анализом показано, что фазовый состав плазменных покрытий и покрытий, полученных при помощи ВЭЛН, отличается. Основными фазами плазменных покрытий являются: γ -Ni, Ni₃B, CrB и Cr₇C₃, покрытий, полученных ВЭЛН: γ -Ni, Fe, α -Fe и Fe₂B. Микротвердость плазменных покрытий выше, чем покрытий, полученных ВЭЛН (400...450 и 650...700 HV, соответственно).

"Работы выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)".

1. М.А. Зленко, А.А. Попович, И.Н. Мутылина. Аддитивные технологии в машиностроении: // СПбГТУ, Санкт-Петербург, 2013; Изд-во СПбГТУ, 2013. С. 210
2. Голковский М.Г., Закалка и наплавка релятивистским электронным пучком вне вакуума. - LAP LAMBERT Academic Publishing, Германия, 2007. – 325 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/344

**ВЛИЯНИЕ СВЯЗУЮЩЕГО НА ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕТАЛЛОПОРОШКОВОЙ
КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ БИМОДАЛЬНОГО ПОРОШКА СПЛАВА 316L**

Торопков Н.Е., Глазкова Е.А., Родкевич Н.Г., Первиков А.В., Лернер М.И.

*Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

В настоящее время существует острая потребность в расширении имеющейся номенклатуры металлопорошковых композиций, используемых для производства деталей сложной формы инъекционным формованием (Powder injection molding (PIM)). Технология PIM включает смешение металлического порошка со связующим органическим веществом (фидсток), впрыскивание полученной композиции в форму (зеленая деталь), удаление связующего (дебиндинг, коричневая деталь) и последующее спекание для получения готовой детали. При разработке металлопорошковых композиций важное значение уделяется выбору связующего. Основные требования к связующему – обеспечение фидстока необходимой текучестью, высокая прочность формованных деталей, быстрое удаление связующего при дебиндинге [1]. В данной работе исследовано влияние состава связующего на свойства металлопорошковой композиции, процессы дебиндинга и спекания формованных деталей.

В работе были использованы бимодальные порошки стали 316L, полученные электрическим взрывом проволоки, и содержащие в своем составе наночастицы размером 50 – 150 нм и микрочастицы с максимальным размером 5 мкм (рисунок 1).

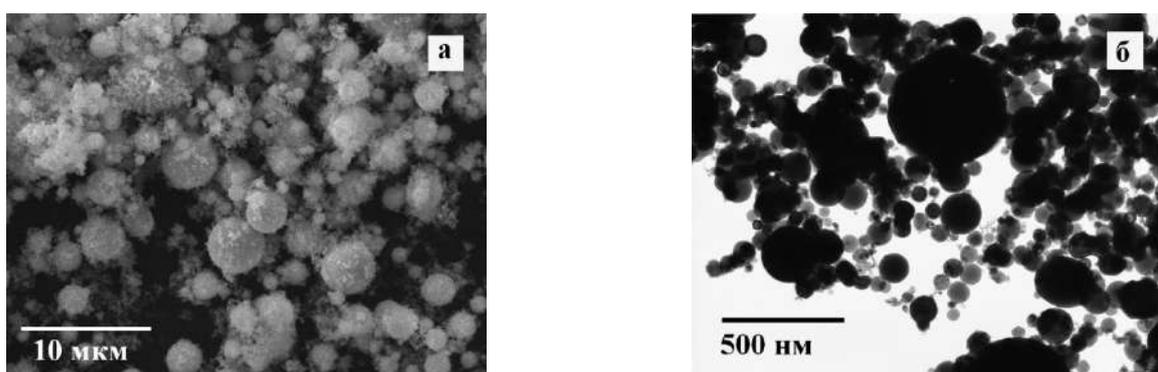


Рис. 1. СЭМ (а) и ПЭМ (б) изображения бимодального порошка сплава 316L

В данной работе использованы три состава связующих: многокомпонентные связующие, включающие термопластичные полимеры PLA/PMMA (I состав), парафин/PE-LD/PMMA (II состав) и парафин (III состав). Кроме того, были использованы процессинговые добавки – дибутилфталат для увеличения пластичности полимеров, и стеариновая кислота для улучшения совместимости бимодальных порошков со связующим. Характеристики полимеров – компонентов связующего – приведены в таблице 1. Для получения металлопорошковой композиции сначала смешивали между собой компоненты связующего, а затем добавляли бимодальный порошок. Исследования образцов многокомпонентного связующего показало, что при содержании PMMA не более 30 об.% наблюдается хорошее совмещение компонентов между собой. Содержание бимодального порошка в фидстоках составляло 91-93 мас. %.

Таблица 1. Характеристики полимеров.

Полимер	ρ , г/см ³	T нач.пл., °C	T деградации, °C	ПТР, г/10 мин
Полиметилметакрилат (PMMA)	1,190	160	350-450	12
Полилактид (PLA)	1,135	140	270-350	12
Полиэтилен низкой плотности (PE-LD)	0,924	95	300-420	20
Парафин	0,950	90	200-330	30

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

Температура плавления фидстоков со связующим I и II состава зависит от содержания РММА. С увеличением содержания РММА в связующем от 5 до 30 об.% температура плавления фидстока I увеличивается от 210 до 230 °С, фидстока II – от 140 до 200 °С. Температура плавления фидстока III составляет около 120 °С. Кроме того, с увеличением содержания РММА возрастает жесткость (прочность) формованных изделий. Однако увеличение температуры формования изделий из фидстока I и II приводит к деградации низкотемпературных компонентов фидстоков. Поэтому оптимальное содержание РММА в связующем для этих композиций составляет 15 об.%. Фидсток III содержит только парафин в качестве связующего, в этом случае «зеленые» детали получаются очень хрупкие и требуют бережного отношения при перемещении, дебиндинге и спекании. Показатель текучести расплава для фидстока I составляет 12,6 г/10 мин, фидстока II – 9,0 г/10 мин, фидстока III – 12,1 г/10 мин.

Термический дебиндинг в вакууме «зеленых» деталей, полученных из фидстоков I и II, приводит к удалению низкотемпературных компонентов связующего, при этом в «коричневых» деталях содержащийся РММА удерживает частицы сплава до спекания. При дебиндинге «зеленых» деталей, полученных из фидстока III, связующее (парафин) удаляется практически полностью, а «коричневые» детали сохраняют форму только за счет низкотемпературного спекания наночастиц. Поэтому для данной композиции требуется увеличить содержание бимодального порошка до 95 мас.%, что приводит к существенному снижению текучести расплава фидстока. При спекании «коричневых» деталей при 1350 °С наблюдается усадка от 20 до 23 %, а плотность спеченных деталей достигает 0,95-0,98 от теоретической.

Проведенные исследования позволили разработать 2 состава связующих для металлопорошковых композиций. Состав I включает PLA (72,5 об.%), РММА (15 об.%), дибутилфталат (4,5 об.%) и стеариновую кислоту (8 об.%). Состав II включает парафин (60,5 об.%), PE-LD (12 об.%) и те же количества РММА, дибутилфталата и стеариновой кислоты.

Таким образом, использование бимодальных порошков, включающих как нано-, так и микрочастицы, и многокомпонентных связующих позволяет получать металлопорошковые композиции для аддитивных и PIM-технологий. Изменение соотношения компонентов в фидстоке позволяет регулировать режимы формования, дебиндинга и спекания образцов для получения деталей с плотностью 0,98.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Соглашение № 14.604.21.0158, идентификационный номер проекта RFMEFI60417X0158).

1. J.-W. Lee, S. Timilsina, G.-W. Kim, J.S. Kim. A new strategy for novel binder discovery in nano and μ powder injection molding: A metaheuristics-assisted virtual combinatorial materials search // Powder Technology. 2016. 302. P. 187–195.

DOI: 10.17223/9785946218412/345

**A COMPARATIVE STUDY OF THE MACROSCOPICAL AND MICROSCOPICAL
FRACTURE MECHANISMS IN CAST AND ADDITIVELY MANUFACTURED
AUSTENITIC STAINLESS STEELS**

Moskvina V.A., Panchenko M.Yu., Maier G.G., Astafurov S.V.,
Melnikov E.V., Rubtsov V.E., Kolubaev E.A., Astafurova E.G.

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia

Using light microscopy and scanning electron microscopy we investigated the peculiarities of tensile fracture mechanisms of industrially cast and wire-feed electron beam additively manufactured austenitic stainless steel specimens. The electron beam wire-feed additive manufacturing (EBAM) method was used to build a wall of AISI 304-type stainless steel on carbon steel plate substrate. AISI 304 stainless steel wire of 1 mm diameter with following chemical composition Fe-19.1Cr-9.1Ni-0.95Si-0.2Mo-0.2Co-0.2Cu-0.15Nb-0.1V-0.12C (wt.%) was used for EBAM processing. The wall freeform fabrication was performed in layer by layer strategy under vacuum condition. Commercially produced cast bars of AISI 321 stainless steel with following chemical composition Fe-17.4Cr-8.8Ni-1.1Mn-0.4Si-0.1Mo-0.2Cu-0.5Ti-0.1V-0.07C (wt.%) was used as a reference material. For the tensile tests, the dumb-bell shaped flat specimens with nominal dimensions of 12×3×1.5 mm (thickness) were cut from the cast billets and from the EBAM-built wall in longitudinal and transverse directions relative to layer growth. Tensile tests to failure were performed for all steel specimens at room temperature and an initial strain rate of $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.

Solution-treated cast AISI 321 specimens had a homogeneous coarse-grained austenitic structure with an average grain size of 20 μm . The microstructure of EBAM as-built specimens was inhomogeneous and consisted of mainly austenitic phase with δ -ferrite vermicular dendrites. EBAM-built specimens were characterized by columnar coarse-grained structure, which is inherent for additively manufactured alloys. Average grain size of austenite increases with the distance from the substrate from about 100 μm at the bottom part of the as-built wall (near substrate) to about 130 μm at the top part of the wall. Additionally to microscopical inhomogeneities in grain structure, a macroscopically layered structure was revealed, which follows the sequence of layer-by-layer EBAM growth of the wall. The anisotropy of the structure in different scales correlates well with the anisotropy of the mechanical properties and fracture mechanisms of longitudinal and transverse EBAM-built AISI 304 steel specimens.

Regardless of the method of manufacturing – additively grown or cast – steels are characterized by the neck formation in the fracture area of the specimens. Fracture for both cast and EBAM specimens occur in a ductile transgranular regime with dimple ruptures on the fracture surfaces. The main differences in deformation and fracture mode between cast and EBAM-built steels were observed on the side surfaces of the specimens. For the cast specimens, a uniform elongation of the grains occurs and a relief with traces of multiple slip (twinning) is observed. Additively manufactured transverse and longitudinal specimens are characterized by complex relief in the lateral surfaces. After fracture, a system of macroscopical bands oriented along the tensile axis is observed on the surfaces of transverse EBAM-built specimens. Inside of these bands, the microbands are located perpendicular to the tensile axis. Microcracks propagate in shear microbands, and fracture of the specimens occurs along them. Deformation of longitudinal EBAM-built specimens occurs more non-uniformly. The system of macroscopical bands oriented along the tensile axis also presents in them, but they are less homogeneous and pronounced as compared with the lateral surface of transverse specimens. Wide microbands oriented perpendicular to the tensile axis were observed. Along them, numerous microcracks propagate close to the area of fracture. Unlike transverse specimens, the microscopical localization of deformation is more developed in all longitudinal specimens. These features are associated with the formation of anisotropic austenitic structure with coarse grains and δ -ferrite dendrites formed during EBAM-processing of austenitic stainless steel.

This research was supported by the Program of Fundamental Researches of the State Academies of Sciences for 2013-2020 (project III.23.2.7).

DOI: 10.17223/9785946218412/346

**MICROSTRUCTURAL INHOMOGENEITY OF PHASE COMPOSITION AND GRAIN
STRUCTURE IN ELECTRON BEAM WIRE-FEED ADDITIVE MANUFACTURED
AISI 304 STAINLESS STEEL**

Panchenko M. Yu., Maier G.G., Moskvina V.A., Melnikov E.V., Astafurov S.V.,
Rubtsov V.E., Kolubaev E.A., Astafurova E.G.

*Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch of Russian Academy of
Sciences, Tomsk, Russia*

We investigated microstructural peculiarities in specimens of AISI 304 stainless steel fabricated by wire-feed electron beam additive manufacturing (EBAM). The EBAM processing was carried out in vacuum chamber under the following parameters: beam acceleration voltage 30 kV, beam current 16.5 mA, scanning frequency 1 kHz, wire-feed rate 200 mm/min, wire thickness 1 mm, ellipse scan 20×20 mm. The AISI 304 steel walls with linear dimensions of $5 \times 30 \times 100$ mm were deposited using layer by layer building principle. A Quanta 200 3D scanning electron microscope equipped with electron back scattered diffraction (EBSD) supply was used to study the microstructure, grain size, and phase composition of the EBAM steel. The magnetophase analysis of the specimens (determination of the volume fraction of ferrite) was carried out using a multifunction vortex-current instrument MVP-2M (Kropus, Russia). Steel specimens were characterized in as-built condition and after post-built heat treatment at a temperature 1050°C for 1 h.

The structure of the as-built steel wall is not uniform in height. A layer structure caused by the deposition method was observed on the etched cross section surfaces of the wall. During the deposition every new layer remelts and solidifies on the top of the previous one. This leads to the formation of heat affect zones between deposited layers. The as-built AISI 304 steel wall exhibits solidified dendritic structure. The direction of the columnar dendrites corresponds with the build direction, which has the highest temperature gradient. The structure is continuous (without interruption at the interface between two deposited layers), but there are misorientations in heat affect zones between deposited layers. The as-built AISI 304 steel wall phase composition is a fine vermicular morphology of δ -ferrite within austenite matrix. The formation of vermicular δ -ferrite is due to the features of cooling rate of the EBAM method and the ratio Cr_{eq}/Ni_{eq} . The vermicular δ -ferrite lamella thickness varies in the range of 0.5–1.5 μm . The volume fraction of ferrite in the as-built wall is 20–25 %. The minimum values of the content of δ -ferrite are observed near the substrate. With an increase in the distance from the substrate, the fraction of δ -ferrite gradually increases, but the changes in the phase composition along the wall height do not exceed 5 %.

The grain structure of as-built AISI 304 steel wall is also heterogeneous. The large columnar grains are oriented along the growth direction and could cross the layers. The grain size varies according to the wall height: in the bottom part (near the substrate) the average grain size is 70 μm , in the top part ≈ 130 μm . Changes in grain size are due to the characteristics of heat dissipation and cooling rate during the deposition process.

Heat treatment at 1050°C for an 1 h leads to a change in the structure of δ -ferrite. Splitting of δ -ferritic colonies into individual dispersed precipitates is observed. The orientation of the colonies is lost, chaotic misorientations are observed, and the thickness of the δ -ferrite lamellae increases significantly. The volume fraction of δ -ferrite in the post-built heat-treated wall is about 2 times less. After heat treatment, austenitic grains have a more equiaxed form and their size *slightly* increase *in comparison* with structure of as-built steel wall, but omogenizing effect of heat treatment on grain size, morphology, and orientation was not significant.

This research was supported by the Program of Fundamental Researches of the State Academies of Sciences for 2013-2020 (project III.23.2.7).

DOI: 10.17223/9785946218412/347

СТРУКТУРА ЖЕЛЕЗОНИКЕЛЕВЫХ ИНВАРОВ, ПОЛУЧЕННЫХ СПЕКАНИЕМ ПОРОШКОВ

Абдульменова Е.В., Кульков С.Н.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Существуют разные методы получения железоникелевых инваров, среди которых порошковая металлургия, которая имеет ряд преимуществ по сравнению с получением сплавов методом литья [1, 2]. Известно [3], что методами порошковой металлургии можно получать сплавы различного состава из порошков чистых металлов, в том числе композиты, однако информации о возможности получения железоникелевых инваров при спекании из смеси порошков Fe и Ni в литературе не достаточно. Тем не менее, данные исследования принципиально важны для развиваемых в настоящее время 3D технологий и инъекционного формования [4, 5], т.к. это позволит синтезировать образцы с требуемым составом.

Промышленные порошки железа и никеля марок ВМ и ПНК-УТ, соответственно, смешивались в механическом смесителе типа «пьяная бочка». Содержание никеля в исходных смесях варьировалась от 30 до 40 % масс. Прессование образцов производили на гидравлическом прессе методом холодного одностороннего прессования при давлении 125 МПа. Спекание образцов проводили в вакуумной печи СНВЭ 1.3.1/16 при температурах 1300 °С и 1350 °С с выдержкой 1 час. Металлографический анализ проводился на микроскопе марки Лабомет-И. Рентгенограммы получены с помощью рентгеновского дифрактометра с фильтрованным медным излучением. Микротвердость H_{μ} спеченных образцов измерялась на приборе ПМТ-3 при нагрузке 1 Н и методом наноиндентирования H_n на приборе NanoIndenter G200/XP при нагрузке 0,4 Н. Для расчета модуля Юнга из данных наноиндентирования использовалось значение коэффициента Пуансона для инварного сплава 0,25 [6]. Дилатометрические испытания проводилось на дилатометре «DIL 402 PC» фирмы NETZSCH.

На рис. 1 представлена типичная структура (а) и рентгенограмма (б) спеченного образца из смеси порошков Fe – 35 % масс. Ni при температуре спекания 1300 °С. Видно (рис 1, а), что в структуре видны поры, в зернах присутствуют двойники, которые характерны γ -фазе инвара [7]. Во всех сплавах после спекания (рис 1, б) формируется фаза с гранцентрированной кубической структурой. В сплавах, содержащих до 35% никеля присутствует остаточная α -фаза с объёмноцентрированной кубической структурой, ее содержание составляет не более 5 %, что согласуется с литературными данными [7]. Возможно, наличие ГЦК-ОЦК состояния обусловлено возникновением концентрационной неоднородности вследствие относительно большого размера порошков.

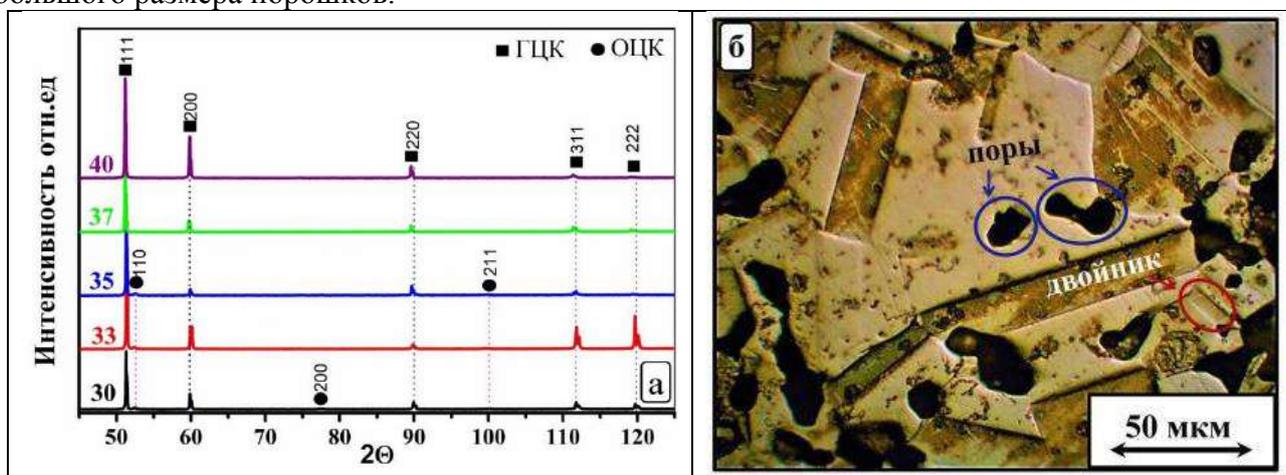


Рис. 1. Типичная структура (а) и рентгенограмма (б) спеченных образцов из смеси порошков с содержанием никеля от 30 до 40 % масс. при температуре спекания 1350 °С.

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

На рис. 2 представлены зависимости параметров решеток γ -фазы от содержания никеля в исходной смеси при обеих температурах спекания. Видно, что параметры решётки сплавов возрастают до 37 % масс. Ni, а при дальнейшем увеличении содержания никеля в смеси не изменяются, что хорошо согласуется с литературными данными [8].

При температурах спекания 1300 °С и 1350 °С модуль Юнга возрастает с ростом содержания никеля, максимальные значения которого составляет 105 ± 15 ГПа и 125 ± 20 ГПа, соответственно. Измеренные значения модуля входят в интервал значений полученных в литературе [6, 9]. Твердость образцов, спеченных при обеих температурах, измеренная двумя методами составляет $1,0 \pm 0,2$ ГПа, что хорошо коррелирует со значением H_c ковального сплава Invar36 [10], которое составляет 1,3 ГПа.

Измеренный коэффициент термического расширения образца Fe-35 % масс. Ni, спечённого при температуре 1350 °С, в интервале 0 – 150 °С и 300 – 500 составляют $1,1 \cdot 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ и $15,8 \cdot 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$, соответственно. Эти значения хорошо коррелирует с литературными данными для инварных сплавов [11].

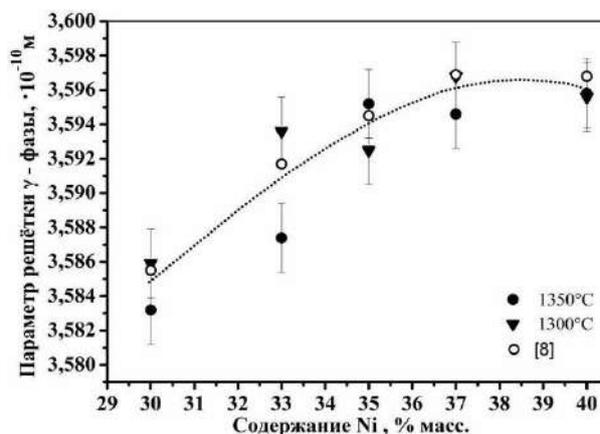


Рис. 2. Параметры решеток γ -фазы в зависимости от содержания никеля в исходной смеси при температурах спекания 1300 и 1350 °С

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-48-700039 p_a.

1. Chang I., Zhao Y. Advances in powder metallurgy: Properties, processing and applications Woodhead Publishing Limited. 2013. 604 p.
2. Кипарисов С. С. Порошковая металлургия. М.: Металлургия, 1980. 496 с.
3. Оглезнева С.А., Саенков К.Л., Гревнов Л.М. Исследование физико-механических свойств и температур фазовых превращений порошковых Fe–Ni-сплавов // Вестник ПНИПУ. 2017. № 3. С. 34 – 48.
4. German R. Metal powder injection molding (MIM): key trends and markets. Handbook of metal injection molding. Woodhead Publishing Limited. 2012. P. 1 – 12.
5. Petzoldt F. Current status and future perspectives of the MIM technology // Ceram. Forum Int. 2012. № 89. P. 11–15.
6. Корицкий Ю. В. Справочник по электротехническим материалам. Л.: Энергоатомиздат. 1988. Т. 3. 726 с.
7. Hidalgo J., Jiménez-Morales A., Barriere T. et al. Mechanical and functional properties of Invar alloy for μ -MIM // Powder Metallurgy. 2014. № 2. P. 127-136.
8. Chamberod A., Laugier J., Penisson J. M. Electron irradiation effects on iron-nickel invar alloys // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 1979. № 10. P. 139-144.
9. Davies J.R. Special-Purpose Nickel Alloys. ASM Specialty Handbook: Nickel, Cobalt and their Alloys. ASM International. 2000. 421 p.
10. Cubberly W.H. Properties and selection – nonferrous alloys and pure metals. ASM Metals handbook. Vol. 2. 1979. ASM International. 3470 p.
11. Лившиц Б. Г., Крапошин В. С., Линецкий Я. Л. Физические свойства металлов и сплавов. М.: Металлургия. 1980. 320 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/348

КИНЕТИКА СТРУКТУРИРОВАНИЯ В АДГЕЗИОННОМ СЛОЕ ПРИ СОЗДАНИИ ОБЪЕКТОВ В ТЕХНОЛОГИИ LOM

^{1,2}Сайфуллин Э.Р., ¹Князева А.Г.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский государственный университет, Томск

Послойное наращивание и синтез трехмерных объектов с помощью применения аддитивных технологий широко распространено во многих сферах нашей жизни, например, в строительстве, медицине, авиационно-космической отрасли. Согласно данным консалтингового агентства Whosler, специализирующегося в сфере быстрого прототипирования и аддитивного производства, мировые доходы аддитивного производства в 2013 г. составили \$3 млрд. Более того, к 2020 г. ожидается рост доходов до \$21 млрд. [1]. Аддитивное производство включает в себя такие технологии, как плавление порошкового слоя, многоструйная печать, селективное лазерное спекание, селективное лазерное плавление. Относительно новой технологией является технология ламинирования (LOM – laminated object manufacturing), заключающаяся в послойном соединении материалов с помощью адгезионного слоя. По сравнению с другими методами аддитивного производства, LOM характеризуется широким разнообразием применяемых материалов, высокой скоростью создания изделий, слабым деформированием изготавливаемого образца и низким уровнем остаточных напряжений [2]. Данные преимущества способствуют развитию технологии LOM для соединения органических материалов, металлических фольг, созданию прекерамической бумаги и композитов [3-4].

В настоящей работе численно исследуются процессы, происходящие непосредственно в адгезионном слое, а также изучается влияние на них технологических параметров установки. В физической постановке настоящей работы рассматривается трехслойная система, состоящая из двух инертных слоев и одного адгезионного. По поверхности верхнего слоя с постоянной скоростью движется нагретый ролик.

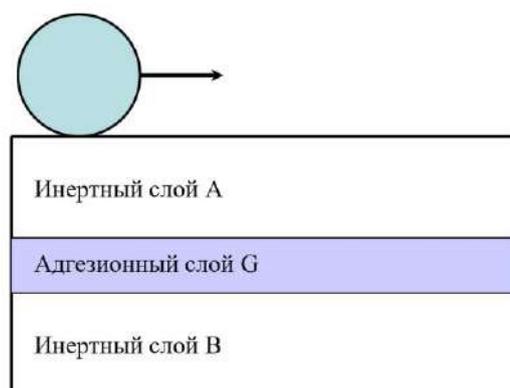


Рис. 1. Иллюстрация к физической постановке параметром

За основу взята теплофизическая модель [5] с возможностью протекания в слое клея процесса структуризации, включающая уравнения теплопроводности для каждого из слоев и кинетическое уравнение, описывающее прямые и обратные структурные превращения в слое клея. Система дополняется соотношением для вычисления максимального напряжения в зоне контакта ролика с инертным слоем и выражением для полуширины площадки контакта, а далее замыкается граничными и начальными условиями. Для численного исследования задачи была использована неявная разностная схема, расщепление по координатам и линейная прогонка.

Результаты исследования показали, что наиболее важным технологическим параметрами, влияющими на степень структуризации адгезионного слоя и распространения тепла в образце, являются скорость движения и давление прижатия ролика. В ходе численных экспериментов выявлена прямая зависимость между давлением прижатия ролика на степень

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

структурных превращений в слое клея. С другой стороны, влияние скорости движения ролла и давления не однозначно, поскольку увеличение скорости движения ролла, с одной стороны, увеличивает размер прогретой области, а с другой – приводит к уменьшению температуры. От давления прижатия зависят скорости как прямой, так и обратной реакций структуризации, что приводит к ограничению максимального значения степени структуризации.

1. Attarah M The rise of 3-D printing: The advantages of additive manufacturing over traditional manufacturing // *Business Horizons*. 2017. V.60. P. 677-688
2. Pham D.T., Gault R.S. A comparison of rapid prototyping technologies // *International Journal of Machine Tools & Manufacture*. 1998. V. 38. P. 1257–1287
3. Precht M., Otto A., Geiger M. Rapid Tooling by Laminated Object Manufacturing of Metal Foil // *Adv. Mater. Res.*. 2015. V. 6-8. P. 303-311.
4. Butt J., Mebrahtu H., Shirvani H. A novel rapid prototyping process for the production of metal parts // *Proceedings of the Second International Conference on Advances in Civil. in Structural and Mechanical Engineering-CSM*. 2014. P.26–29.
5. Knyazeva A.G. of Chemical Conversion Initiation in the Adhesive Bonding Initiation in the Adhesive Bonding Layer During Roll Motion in the Process of Laminated Object Creation // *Nanoscience and Technology: An International Journal*. 2018. P. 1-13.

DOI: 10.17223/9785946218412/349

**СТРУКТУРА ПОЛИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ 3D-ПЕЧАТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОВОЛОКИ ИЗ
НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ 12X18H9T И МЕДИ М1**

Осипович К.С., Воронцов А.В., Калашников К.Н., Калашникова Т.А.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Полиметаллические материалы востребованы в приложениях, в которых условия эксплуатации детали меняются в зависимости от локального воздействия окружающей среды, и, следовательно, требования к материалу также меняются в зависимости от окружающих условий. Для применения в экстремальных условиях окружающей среды, например, в аэрокосмической отрасли или в ядерной энергетике, требуются детали, которые, например, должны работать при радикально различных температурах в разных зонах детали. Следовательно, такие свойства, как устойчивость к коррозии и окислению, прочность, ударная вязкость, износостойкость, малый вес и разумная стоимость, могут потребоваться, например, в различных областях компонента двигателя, но редко встречаются в одном материале. Поэтому требуется объединение разнородных материалов, то есть создание полиметаллических изделий.

Полиметаллические изделия из нержавеющей стали 12X18H9T и меди М1 позволяют формировать изделия, обладающие высокими электрофизическими свойствами меди и прочностными и коррозионными свойствами стали. Традиционные методы изготовления деталей не решают проблемы разных физико-химических свойств данных материалов, поэтому изготовление полиметаллических изделий на основе нержавеющей стали и меди затруднено. В настоящее время существуют методы изготовления деталей, в которых процесс формирования протекает в атмосфере высокого вакуума и при высоких температурах при оптимальных параметрах. К таким методам относится электронно-лучевая 3D-печать с использованием проволоки. Поэтому целью данной работы является исследование формирования полиметаллических изделий, изготовленных методом электронно-лучевой 3D-печати с использованием проволоки из нержавеющей стали 12X18H9T и меди М1.

Полиметаллический образец из материалов 12X18H9T и медь М1 был получен последовательным уменьшением подачи нержавеющей стали и увеличением подачи меди таким образом, чтобы первые слои представляли собой только сталь 12X18H9T, а последние – медь марки М1. С помощью использования такой технологии формируется плавная градиентная переходная граница от нержавеющей стали к меди. Структура металла в граничной зоне образца представлена смесью крупных дендритов аустенитной стали и кристаллизовавшейся между дендритами меди. При этом имеется достаточно четко выделяющаяся граница между медными и стальными слоями, по обе стороны от которой имеется убывающий градиент взаимно-перемешанного металла. Протяженность граничной зоны может быть в интервале от 100 мкм до 3 мм, что может превышать толщину наносимого аддитивным методом слоя. Содержание меди в граничных слоях аустенитной стали может достигать более 30%, содержание стали в граничных медных слоях в основном меньше. При удалении от граничной зоны происходит изменение содержания меди в стали. Помимо небольших участков в междендритных пространствах имеются области, занятые медью, размером более 100 ÷ 200 мкм, которые могут находиться на глубине > 1 мм от границы между слоями. Исходя из диаграммы состояния, в системе "Cu-Fe" не образуется приводящих к охрупчиванию интерметаллидных фаз, а исходные компоненты обладают низкой взаимной растворимостью, потому структура металла в граничной зоне представлена механической смесью меди и аустенитной стали.

Исследование формирования структуры полиметаллов Fe-Cu показывают, что в данной паре материалов характерна высокая приспособляемость компонентов полиметаллического образца друг к другу. Данная особенность четко выявляется по толщине переходного слоя

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

между сталью и медью. Разупрочнения на границе материалов не происходит, прочностные свойства системы находятся на уровне меди марки М1 в литом состоянии.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)

DOI: 10.17223/9785946218412/350

**ПОВЫШЕНИЕ ИЗНОСОСТОЙКОСТИ 3D-НАПЕЧАТАННЫХ ОБРАЗЦОВ
ТИТАНОВОГО СПЛАВА Ti-6Al-4V ПУТЕМ ОКСИДИРОВАНИЯ**

¹Евтушенко О.В., ¹Панин А.В., ¹Казаченок М.С., ²Буслович Д.Г., ¹Мартынов С.А.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск*

3D-напечатанные изделия могут быть использованы в различных отраслях промышленности, и в том числе при производстве сложных узлов аэрокосмической, транспортной и оборонной техники [1]. Наряду с водородным охрупчиванием низкая износостойкость 3D-напечатанных изделий из титанового сплава Ti-6Al-4V, как и прокатанного сплава Ti-6Al-4V является значительным недостатком. Антифрикционные свойства титанового сплава Ti-6Al-4V можно повысить различными способами модифицирования поверхности, такими как альфирование [2], анодирование, азотирование, плазменное электролитическое оксидирование, термическое оксидирование и др. При этом термическое оксидирование поверхности является наиболее простой и действенной химико-термической обработкой. Промышленностью освоено термическое оксидирование трех основных типов для прокатанного сплава Ti-6Al-4V: низкотемпературное оксидирование (НТО) при 700÷800 °С и выдержке 1÷12 ч с медленным охлаждением (с печью); высокотемпературное оксидирование (ВТО) при 850 °С и выдержке 5÷6 ч с охлаждением в воде для удаления окалина; оксидирование с засыпкой графитом или песком в интервале температур 700÷800 °С при выдержке 2÷10 ч с охлаждением на воздухе (альфирование) [3]. Поскольку процесс оксидирования в значительной степени зависит от микроструктуры материала, то выяснение закономерностей оксидирования 3D-напечатанных изделий является актуальной задачей. В настоящей работе исследовано влияние НТО оксидирования на износостойкость образцов из титанового сплава Ti-6Al-4V, полученных методом 3D-печати.

3D-печать образцов титанового сплава Ti-6Al-4V осуществлялась методом электронно-лучевого плавления сварочной титановой проволоки диаметром 1.6 мм на установке 6E400 (ООО «НПК ТЭТа», Томск). Термическое оксидирование 3D-напечатанных образцов титанового сплава Ti-6Al-4V проводили в муфельной печи при температуре 700 °С и времени выдержки 4 и 8 ч, с последующим охлаждением в печи. Объемный износ образцов в режиме сухого трения скольжения определяли по схеме «шар-по-диску» на трибометре CSEM CH2000 при нагрузке $P = 5$ Н и скорости скольжения $V = 25$ мм/с. Радиус контртела в виде шарика из WC₈ составлял 6 мм. Радиус трека составлял 2 мм. Износ материала определяли по профилю дорожки трения на контактном профилометре Alpha-step IQ. Рентгеноструктурные исследования 3D-напечатанных образцов титанового сплава Ti-6Al-4V проводили при комнатной температуре на дифрактометре Shimadzu XRD-6000 в Cu-K α излучении (для отсеечения β -излучения использовали монохроматор). Для анализа фазового состава, структуры в поверхностных и более глубоких слоях использовали симметричные (Брэгга–Брентано) и асимметричные схемы съемок. Съемки рентгенограмм проводили в диапазоне углов скольжения α от $\alpha=3^\circ$ до $\alpha=7^\circ$.

Методами рентгеноструктурного анализа установлено, что фазовый состав оксидного слоя, формирующегося на поверхности 3D-напечатанных образцов титанового сплава Ti-6Al-4V, оказывается неоднородным по толщине: верхний (наружный) слой состоит из рутила TiO₂, далее располагается слой оксида алюминия Al₂O₃.

Показано, что оксидирование приводит к повышению износостойкости в 3D-напечатанных образцах титанового сплава Ti-6Al-4V по сравнению с 3D-напечатанными образцами титанового сплава Ti-6Al-4V без оксидирования, и сопоставим с износостойкостью оксидированного прокатанного сплава Ti-6Al-4V. Установлен стадийный характер зависимостей коэффициента трения и интенсивности износа от длины пути трения в 3D-напечатанных образцах титанового сплава Ti-6Al-4V, подвергнутых НТО оксидированию. Коэффициент трения на первой стадии составляет 0.2, на второй стадии возрастает до 0.6 и на

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

третьей стадии уменьшается до 0.37, что соответствует коэффициенту трения в 3D-напечатанных образцах титанового сплава Ti-6Al-4V.

1. Murr L.E., Gaytan S. M., Ramirez D. A., et al. Metal Fabrication by Additive Manufacturing Using Laser and Electron Beam Melting Technologies // *Journal of Materials Science & Technology*. 2012. V. 28. P. 1-14.
2. Прокопьев И.В., Жуковский В.Б. Создание износостойкого покрытия деталей из титановых сплавов методом альфирования поверхности // *Решетневские чтения*. 2013. Т.1. №17. С. 435.
3. Горынин, И.В. Титан в машиностроении / И.В. Горынин, Б.Б. Чечулин. – М.: Машиностроение, 1990. – 400 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/351

**ОБРАЗОВАНИЕ α'' МАРТЕНСИТА В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ Ti-6Al-4V,
ПОЛУЧЕННОМ МЕТОДОМ 3D-ПЕЧАТИ**

¹Перевалова О.Б., ^{1,2}Панин А.В., ¹Казаченок М.С.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

Метод 3D-печати для получения изделий из титановых сплавов в настоящее время активно развивается. Это обусловлено широким спектром применения титановых сплавов. Наиболее экономичным является метод, основанный на плавлении подаваемого проволочного материала под действием электронного пучка (EBF³). Однако особенностью данного метода является достаточно большой размер наследственного β -зерна, достигающий нескольких миллиметров. Для уменьшения β -зерна применяется водяное охлаждение подложки, на которую послойно наращивается изделие. При аддитивных технологиях с различными видами плавления порошка не всегда удается получить двухфазную ($\alpha+\beta$) структуру сплава Ti-6Al-4V, оптимальную для механических характеристик [1]. Появляется α'' фаза, присутствие которой понижает предел текучести и увеличивает пластичность. В связи с этим в настоящей работе поставлена задача исследования влияния охлаждения подложки в процессе 3D-печати на размер β -зерна, фазовый состав и параметры кристаллической решетки α -Ti в образцах сплава Ti-6Al-4V.

Материалом исследования являлся титановый сплав Ti-6Al-4V. Образцы были изготовлены путем плавления проволоки диаметром 1.6 мм плазменным источником энергии в вакуумной камере при давлении 1.3×10^{-3} Па и ускоряющем напряжении 30 кВ. Процесс 3D-печати проводился как с водяным охлаждением подложки, так и без охлаждения. Рентгеноструктурные исследования (РСА) осуществлялись на дифрактометре ДРОН-7 в Co K_{α} -излучении, определялся фазовый состав, объемная доля вторых фаз (β -Ti + α'' -Ti), параметры кристаллической решетки фазы α -Ti и полные среднеквадратичные смещения атомов $\langle u^2 \rangle$ в фазе α -Ti. Упругую макродеформацию в поверхностных слоях определяли при асимметричной рентгеновской съемке (метод $\sin^2\psi$). Методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии (ПЭМ) на электронном микроскопе JEM 2100 исследовали микроструктуру и фазовый состав.

При водяном охлаждении подложки поперечный и продольный размеры β -зерен в образце уменьшаются втрое по сравнению с образцом, получаемым без охлаждения и составляют 0.5 мм и 2.5 мм соответственно. Методом РСА установлено, что при охлаждении подложки возрастает интенсивность пика 011 β -Ti. Объемная доля β -Ti в образце с охлаждением оказывается вдвое больше, чем в образце без охлаждения, и составляет 4%. Фаза α'' -Ti отсутствует. Объемная доля вторых фаз (β -Ti и α'' -Ti) в образцах, полученных с охлаждением подложки водой, варьируется в пределах 4-6%, тогда как без водяного охлаждения - 8-14%. В образцах, изготовленных без охлаждения, фаза α'' -Ti выявляется как методом РСА так и методом ПЭМ. Эта фаза является нанокристаллической и располагается на границах зерен. Вероятной причиной увеличения объемной доли фазы α'' -Ti в образцах без водяного охлаждения может являться наличие остаточного кислорода, который всегда присутствует в вакуумной камере. Косвенным доказательством наличия атомов внедрения являются высокие значения параметров a и c и полных среднеквадратичных смещений атомов в кристаллической решетке α фазы. Увеличение смещений атомов создает неустойчивое состояние в кристаллической решетке α фазы, создавая предпосылки для фазового перехода $\alpha \rightarrow \alpha''$.

DOI: 10.17223/9785946218412/352

**УДАРНАЯ ВЯЗКОСТЬ ОБРАЗЦОВ ИЗ ТИТАНОВОГО СПЛАВА Ti-6Al-4V,
ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

Казаченок М.С., Власов И.В., Панин А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Россия

kms@ispms.tsc.ru

В настоящее время наблюдается громадный интерес к проведению фундаментальных, поисковых и прикладных исследований в области получения трехмерных металлических изделий методом аддитивных технологий, основанных на плавлении металлического порошка или проволоки лазерным или электронным лучами. Однако, несмотря на высокие прочностные свойства 3D-напечатанных металлов и сплавов, они характеризуются относительно низкими значениями ударной вязкости. Например, энергия разрушения изделий из титанового сплава Ti-6Al-4V, полученных методом селективного лазерного плавления, не превышает 10 Дж [1]. Последнее обусловлено наличием в 3D-напечатанных образцах Ti-6Al-4V большой объемной доли гексагональной плотноупакованной α' -фазы.

Исследования ударной вязкости прокатанных образцов Ti-6Al-4V выявили существенную зависимость величины энергии разрушения от их микроструктуры. Так, величина энергии разрушения в образцах, имеющих мартенситную структуру, составляет 34-49 Дж, а в образцах с бимодальной структурой – 27-36 Дж [2]. Наконец, энергии разрушения образцов Ti-6Al-4V, имеющих равноосную микроструктуру, варьируется в пределах 8-41 Дж. Естественно ожидать, что в зависимости от метода 3D-печати изделия из титанового сплава Ti-6Al-4V будут характеризоваться не только различной структурой, но и различными величинами динамической прочности и пластичности при ударном изгибе. Целью настоящей работы является сравнительный анализ микроструктуры, характера разрушения и величины ударной вязкости образцов титанового сплава Ti-6Al-4V, полученных методами прокатки, селективного лазерного плавления порошка Ti-6Al-4V (англ. Selective laser melting, SLM), электронно-лучевой плавки порошка Ti-6Al-4V (англ. Electron-beam melting, EBM) и проволоки Ti-6Al-4V (англ. Electron Beam Free-Form Fabrication, EBF³).

Для испытания на ударную вязкость были вырезаны образцы Шарпи размерами 10×10×55 мм с V-образным надрезом радиусом 0,25±0,025 мм. Ударную вязкость (KCV) определяли на автоматизированном копре Instron 450MPX, обеспечивающем запись диаграммы разрушения исследованных образцов в координатах «ударная нагрузка - изгиб образца». Микроструктуру образцов Ti-6Al-4V изучали с помощью оптического микроскопа Zeiss Axiovert 40 MAT. Фрактографические исследования образцов Ti-6Al-4V проводили на растровом электронном микроскопе LEO EVO 50.

Анализ диаграмм разрушения показал, что в условиях динамического нагружения 3D-напечатанные образцы Ti-6Al-4V характеризуются значительно меньшей пластичностью по сравнению с образцами Ti-6Al-4V, полученными методами прокатки. При этом величина энергии разрушения 3D-напечатанных образцов Ti-6Al-4V существенным образом зависит от метода их получения. Максимальной величиной ударной вязкости характеризуются образцы, полученные методом EBF³, микроструктура которых представляет собой крупные столбчатые β -зерна, внутри которых формируется структура игольчатого α' -мартенсита.

Сравнительный анализ силовых параметров ударной вязкости образцов Ti-6Al-4V, полученных путем электронно-лучевого плавления соответствующего порошка или проволоки (EBM и EBF³), показал, что, в обоих случаях трещина зарождается при близких значениях максимальной нагрузки, однако на этапе распространения магистральной трещины в EBF³-образцах нагрузка снижается более медленно, обуславливая более высокие значения KCV.

1. Evren Yasa, Jan Deckers, Jean-Pierre Kruth, Marleen Rombouts & Jan Luyten (2010) Charpy impact testing of metallic selective laser melting parts // Virtual and Physical Prototyping, 5:2, 89-98, DOI: 10.1080/17452751003703894.
2. Christophe Buirette, Julitte Huez, Nathalie Gey, Alain Vassel, Eric Andrie. Study of crack propagation mechanisms during Charpy impact toughness tests on both equiaxed and lamellar microstructures of Ti-6Al-4V titanium alloy // Materials Science & Engineering A, 618 (2014) 546–557.

DOI: 10.17223/9785946218412/353

ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВАЯ АДДИТИВНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ
КОМПОЗИТА TiC/ Ti-6Al-4V

^{1,2}Буйлук А.О., ^{1,2}Панин А.В., ¹Казаченок М.С.

¹Институт физики прочности и материаловедения, Томск

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск

Современные темпы развития промышленности требуют выбора технологий производства, выполняемых в кратчайшие сроки с наименьшими затратами [1]. Наряду с новыми и передовыми технологиями можно отметить быстрое развитие аддитивных технологий, позволяющих создавать металлические изделия уникальной формы. Одним из наиболее распространенных методов аддитивных технологий является электронно-лучевое плавление проволоки (Electron Beam Freeform Fabrication – EBF³). Преимуществами данного метода является дешевизна изготовления деталей, так как отходы во время печати практически отсутствуют, а также довольно высокая, по сравнению с другими технологиями, скорость создания объекта. Недостатком данного метода является формирование неоднородной структуры с крупными столбчатыми зёрнами. Последнее негативно сказывается на механических свойствах 3D-напечатанных изделий. Одним из способов уменьшения размера зёрен, а, следовательно, повышения механических характеристик 3D-напечатанных изделий является введение в ванну расплава тугоплавких порошков, оказывающих влияние на процесс кристаллизации [2]. В данной работе разработана технология одновременного электронно-лучевого плавления проволоки Ti-6Al-4V и порошка TiC, и исследовано влияние параметров 3D-печати на микроструктуру и механические свойства образцов TiC/Ti-6Al-4V.

Для увеличения сыпучести мелкодисперсного порошка TiC, а также с целью изменения объемной доли карбидов титана в 3D-напечатанных образцах TiC/Ti-6Al-4V первоначально получали механокомпозит TiC/Ti-6Al-4V путем механоактивации порошков TiC и Ti-6Al-4V в шаровой мельнице 8000M Mixer/Mill. На установке 6E400 (ООО «НПК ТЭТа», Томск) были изготовлены 2 партии образцов. В первом случае, путем электронно-лучевого плавления проволоки Ti-6Al-4V осуществляли 3D-печать образцов соответствующего состава, а во втором - получали образцы TiC/Ti-6Al-4V за счет одновременной подачи в ванну расплава проволоки Ti-6Al-4V и порошкового механокомпозита TiC/Ti-6Al-4V.

Микроструктуру 3D-напечатанных образцов TiC/Ti-6Al-4V изучали на оптическом микроскопе ZEISS AXIOVERT 40 MAT. Элементный анализ образцов проводили на растровом электронном микроскопе LEO EVO 50, оборудованном приставками Oxford Instruments INCAx-act. Микротвердость измеряли на твердомере ПМТ-3 при нагрузке 50 грамм. Испытания на одноосное статическое растяжение проводили на испытательной машине INSTRON 5582 при комнатной температуре.

Установлено, что микроструктура 3D-напечатанных образцов Ti-6Al-4V, полученных электронно-лучевым плавлением проволоки соответствующего состава, состоит из столбчатых зёрен, поперечный размер которых составляет 1 мм, а их продольный размер ограничивается высотой создаваемого изделия. Внутри зёрен наблюдается пластинчатая морфология разной ориентации. При электронно-лучевом плавлении проволоки Ti-6Al-4V с добавлением механокомпозита TiC/Ti-6Al-4V в образцах формируется структура с более мелкими равноосными зёрнами, размер которых зависит от объемной доли TiC в механокомпозите.

Одновременная подача проволоки Ti-6Al-4V и порошкового механокомпозита TiC/Ti-6Al-4V в процессе 3D-печати обуславливает существенное увеличение микротвердости и прочностных характеристик 3D-напечатанных изделий при испытаниях на одноосное растяжение.

1. Гончарова О.Н., Бережной Ю.М., Бессарабов Е.Н., Кадамов Е.А., Гайнутдинов Т.М., Нагопетьян Е.М., Ковина В.М. Аддитивные технологии – динамично развивающееся производство: Справочник: инженерный вестник № 4.2016.

2. Илларионов А.Г., Попов А.А. Технологические и эксплуатационные свойства титановых сплавов: учебное пособие / А.Г. Илларионов, А.А. Попов. – Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2014. – 137 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/354

**ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СВАРНОГО ШВА В 3D-НАПЕЧАТАННЫХ
ИЗДЕЛИЯХ ИЗ ТИТАНОВОГО СПЛАВА Ti-6Al-4V**

^{1,2}Яхин А., ^{1,2}Панин А. В.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²Томский политехнический университет, Томск

В настоящее время весьма перспективным и новым направлением в машиностроении и технике является изготовление деталей методами аддитивных технологий. Суть применения данных технологий заключается в создании модели путем наслаивания вещества. Основными преимуществами данных технологий является удобство и скорость изготовления деталей с сохранением требуемых свойств, широкий ассортимент используемых материалов, а также экономичность, поскольку отходы практически отсутствуют. В связи с этим целесообразно использование аддитивных технологий для печати из металлов. Получение металлической модели связано с применением в аддитивном производстве различных сварочных технологий.

Особенно актуально применение 3D-печати в авиастроении, для получения изделий из титановых сплавов, например, из сплава Ti-6Al-4V. Однако методы послойного синтеза и формирование объемных изделий концентрированными потоками энергии (лазерными, электронными, ионными) не позволяют на данный момент полностью задавать требуемые свойства ввиду наличия в получаемом изделии дефектов, несовершенства структуры, внутренних напряжений. Поэтому размер получаемых деталей не может быть слишком крупным, и невозможно напечатать полностью конечное изделие, в связи с чем, остается необходимость в сварке узлов и деталей между собой. Получение изделий из сплава Ti-6Al-4V методом 3D-печати и изучение их свариваемости имеет важную практическую значимость как для авиа-ракетостроения, так и для всего машиностроения в целом.

В исследовании представлено изучение сварных швов в образцах из титанового сплава Ti-6Al-4V. Электронно-лучевая сварка проводилась для образцов, полученных прокаткой (в состоянии поставки) и для аддитивно полученных образцов методом электронно-лучевого сплавления. Процессы сварки и 3D-печати осуществлялись на установке электронно-лучевой сварки 6E400 (ООО «НПК ТЭТа», Томск). Микроструктуру образцов изучали на оптическом микроскопе ZEISS AXIOVERT 40 MAT. Микротвердость измеряли на твердомере ПМТ-3 при нагрузке 100 грамм.

Проведен сравнительный анализ микроструктуры шва и зоны термического влияния в прокатанных образцах, и в образцах, полученных методом 3D-печати. Продемонстрировано влияние толщины свариваемых пластин. Показано, что при электронно-лучевой сварке образцов Ti-6Al-4V, полученных как прокаткой, так методом аддитивных технологий, наблюдается несколько сварочных зон: основной металл, зона термического влияния и зона сварного шва. Микроструктура последней представляет собой вытянутые β -зерна с игольчатой α' -фазой. При этом, средний размер зерен, образованных в прокатанных и 3D напечатанных образцах, существенно отличается. Обнаружено, что в зоне термического влияния у образцов Ti-6Al-4V, полученных методом прокатки, происходит рост и образование мелких равноосных зерен, в отличие от зоны термического влияния образца, полученного аддитивными методами, где этого не наблюдается. Исходя из результатов металлографического анализа предполагается повышение концентрации α' -фазы в направлении от основного металла к сварному шву.

Анализ распределения микротвердости в сварном шве исследуемых образцов показал, что в центре сварного шва максимум значений микротвердости (Таблица 1). Микротвердость в зоне термического влияния у проката сопоставима с микротвердостью основного металла, в отличие от зоны термического влияния 3D напечатанных образцов, где твердость имеет тенденцию к снижению.

Таблица 1. Значения микротвердости в разных зонах сварки.

Образец	Основной металл	ЗТВ*	Сварной шов
Прокат	3900-4000	4100-4500	4500-5100
3D-печать	4000-4200	3800-4400	4400-4900

*зона термического влияния

DOI: 10.17223/9785946218412/355

**ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВАЯ АДДИТИВНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ Al-Mg СПЛАВА:
МАКРОСТРУКТУРА И РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ**

Воронцов А.В., Утяганова В.Р., Шамарин Н.Н., Жуков Л.Л.
Институт физики прочности и материаловедения, Томск

Алюминиево-магниевого сплавы широко используются в промышленности. Высокая удельная прочность и низкий вес алюминиево-магниевого сплава дают возможность использования их в несущих конструкциях.

Аддитивные технологии – очень эффективный метод создания изделий как с экономической, так и с технологической точки зрения. Электронно-лучевой метод аддитивной технологии происходит в вакууме, что дает некоторые преимущества перед аддитивным производством происходящем на воздухе или защитной среде таких как дуговые и лазерные аддитивные технологии.

Преимущественно, для аддитивного производства из алюминиево-магниевого сплава существует ряд проблем, среди которых главным образом повышенная пористость и выгорание магния. В работе было показано, что потеря легирующих элементов в электронно-лучевой аддитивной технологии можно скомпенсировать путем подбора материала проволоки с повышенным содержанием легкоплавких легирующих элементов.

В этой работе, методом электронно-лучевой проволоочной аддитивной технологии был получен образец из сплава AlMg5. Проводили исследования макроструктуры, микротвердости в направлении печати образца, а также рентгеновский анализ для оценки параметра решетки и микроискажений полученного образца. Произведенные исследования позволили оценить однородность образца в зависимости от его высоты.

Полученный образец в форме стенки имел следующие геометрические размеры: высота – 31мм, ширина - 75мм, толщина стенки составляла 5-6мм. Количество напечатанных слоев составило 37. Параметры электронного пучка были следующие: напряжение на аноде - 30 кВ, ток пучка варьировался в зависимости от номера слоя и составлял 25-22 мА. В качестве сырья для аддитивной технологии была выбрана проволока, диаметром 1,2 мм. Скорость подачи проволоки алюминиево-магниевого сплава составляла 1,6 м/мин.

В результате, в процессе электронно-лучевой проволоочной аддитивной технологии распределение энергии по напечатанным слоям Al-Mg сплава выглядит следующим образом. На протяжении всего процесса печати напряжение на аноде оставалось равным 30 кВ. При печати первых слоев ток пучка был наибольшим и составлял 25 мА. После прохождения первого слоя ток пучка постепенно уменьшали и начиная с 17 слоя печати ток оставался неизменным и равным 22 мА. На рис. 1а изображен график распределения энергозатрат на каждый напечатанный слой.

Макроструктура полученного образца приведена на рис. 1б. Образец получился без пор, толщина слоев, границы которых выделены желтым цветом, более равномерна в верхней части образца. В нижней части и середине образца наблюдается неравномерное распределение материала.

Различия по высоте напечатанного образца также выявляются при измерении микротвердости вдоль направления печати. Зависимость значений микротвердости от высоты образца показывает постепенное снижение микротвердости. На уровне первого слоя значение микротвердости составляет 0,84 GPa, в верхних напечатанных слоях значение понизилось до 0,79 GPa. Мы полагаем, что повышенная микротвердость в нижней части образца обусловлена более равномерным распределением легирующих элементов в сплаве из-за более длительного нахождения при повышенной температуре в сравнении с верхней его частью.

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

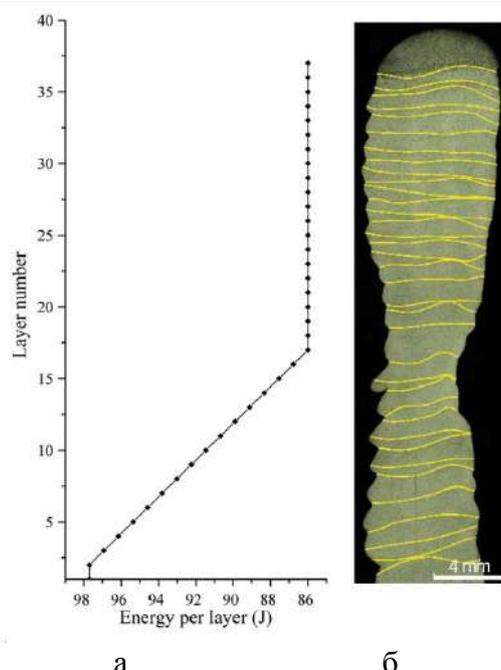


Рис. 1 Расчет энергозатрат в процессе печати Al-Mg сплава – а, макроструктура полученного электронно-лучевой проволоночной аддитивной технологией образца – б, желтыми линиями выделены границы между слоями

При рентгеновском анализе полученного образца выявили, что параметр решетки в нижних и верхних слоях при печати отличаются. Прецизионное определение параметра решетки проводили с использованием экстраполяционной функции Нельсона-Райли. Для нижних слоев образца получили параметр решетки 4,0673 Å. Верхние слои образца имеют параметр решетки 4,0651 Å, что значительно меньше в сравнении параметром решетки в нижних слоях.

Также произвели расчеты для определения микроискажений графическим методом Вильямсона – Холла в квадратичной форме. Получили уравнения экстраполяционных прямых, для нижних слоев (1) и для верхних слоев (2):

$$y=1.415E-05x+1.806E-04 \quad (1)$$

$$y=1.695E-05x+6.010E-05 \quad (2)$$

Нашли численное значение микроискажений ϵ^{II} рода из уравнений прямых по формуле 3:

$$\epsilon^{\text{II}} = \frac{\sqrt{k}}{4} 100\%, \text{ где } k - \text{ тангенс угла наклона прямой} \quad (3)$$

Для нижней части образца $\epsilon^{\text{II}}=0.094\%$. Для слоев из верхней части $\epsilon^{\text{II}}=0.103\%$. Ввиду того, что нижняя часть образца пребывала более продолжительное время при высокой температуре, чем верхняя его часть полагаем, что в процессе печати происходит гомогенизированный отжиг. При чем влияние отжига наиболее ощутимо в нижней части образца.

Финансирование

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/356

СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ
АЛЮМИНИЕВО-МАГНИЕВОГО СПЛАВА

Воронцов А.В., Утяганова В.Р., Шамарин Н.Н., Дмитриев А.В.
Институт физики прочности и материаловедения, Томск

Высокая теплопроводность и отражательная способность алюминиевых сплавов в значительной степени влияют на выбор метода обработки. Также существует ряд проблем, связанных с образованием оксидной пленки на поверхности сплава при его термической обработке, испарение легкоплавких легирующих элементов, повышенное порообразование. В аддитивных технологиях широкое применение находят методы дуговые аддитивные технологии, происходящие в защитной среде, а также порошковая лазерная аддитивная технология. Подобные методы имеют общие проблемы такие как образование оксидов в процессе печати, пористость.

При электронно-лучевой технологии, в отличие от дуговой и лазерной технологии, весь процесс печати происходит в вакууме, что обеспечивает защиту от появления оксидов. Одним из распространенных алюминиевых сплавов являются сплавы системы Al–Mg. При сравнительно невысокой стоимости материала Al–Mg сплавы имеют хорошие конструкционные свойства. Известной проблемой сплавов системы Al–Mg в аддитивной технологии является выгорание Mg. При печати электронно-лучевым методом это проблема является одной из главных. Выгорание магния при электронно-лучевой аддитивной технологии довольно подробно изучалось [7,8]. Авторы приходят к выводу, что данная проблема решается применением первоначального сырья с повышенным содержанием магния.

В этой работе, для получения изделия в виде стенки из сплава AMg5 использовали электронно-лучевую проволочную аддитивную технологию.

В процессе формирования изделий электронно-лучевой проволочной аддитивной технологией использовали алюминий-магний-сплавы AMG5 в виде проволоки, диаметром 1,2мм.

Параметры электронного пучка в процессе печати были следующие: напряжение на аноде было постоянным на протяжении всего процесса печати и составляло 30 кВ, ток электронного пучка нелинейно варьировался в зависимости от количества напечатанных слоев. На первом слое ток пучка составлял 45,0 мА, далее постепенное уменьшение тока пучка до 23,07 мА на верхнем слое. Количество напечатанных слоев составило 15. Скорость подачи проволоки была 1,9 м/мин.

В результате процесса электронно-лучевой проволочной аддитивной технологии получили образец высотой 16,0 мм. Протяженность стенки (слоев) составила 75 мм, толщина стенки варьировалась от 4,0 до 6,0 мм. На рис. 1а представлен график распределения энергозатрат на каждый слой с учетом варьирования тока электронного пучка в процессе печати.

На рис. 1б приведено изображение полученного образца в поперечном сечении при 50 кратном увеличении. В полученном образце как в нижних, так и в верхних слоях наблюдаются поры. Очевидно влияние теплофизических свойств в процессе печати. Из-за большой теплопроводности, формирование первых слоев происходило нестабильно, наблюдается неравномерное распределение материала до слоя №7. Выше слоя №7 процесс более стабилен, наблюдаются более ровные внешние края полученного образца, хотя пор избежать так и не получилось.

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

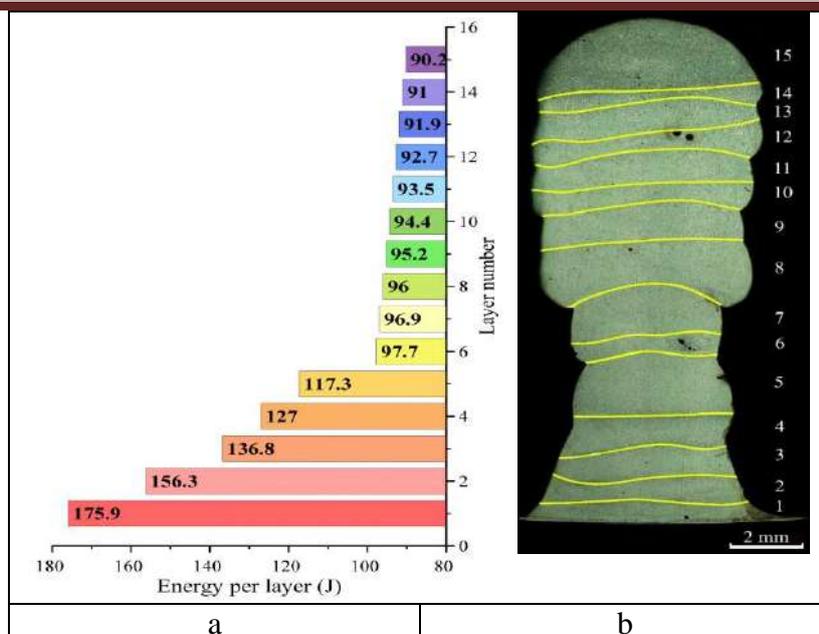


Рис. 1 а – расчет послойного распределения энергии в процессе электронно-лучевой проволочной аддитивной технологии АМГ5, б – макроструктура образца, полученного электронно-лучевой проволочной аддитивной технологией, желтыми линиями выделены границы между слоями

Проведенные измерения микротвердости образца показали также неравномерное распределение значений микротвердости по высоте. На рис. 2 показано распределение микротвердости от подложки до верхнего слоя и приведена статистика распределения полученных данных. Из графика очевидно, что зависимость снижения значений микротвердости линейная. Исходя из этой зависимости полагаем, что в процессе печати Al-Mg сплава, слои находящиеся внизу и подверженные более длительному по времени тепловому воздействию испытывают отжиг в следствие чего более равномерное распределение легирующих элементов.

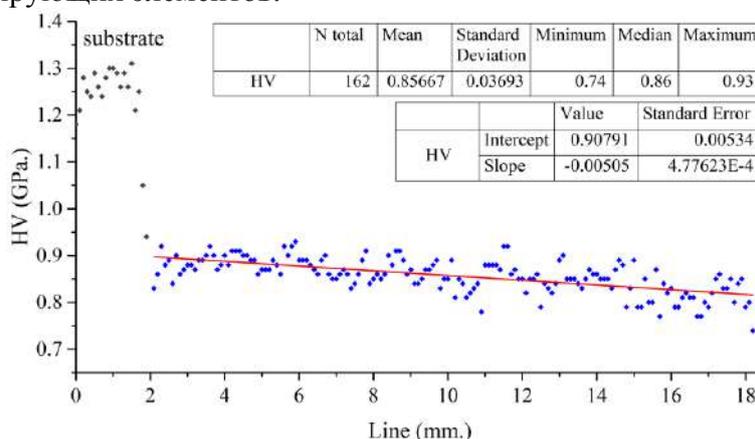


Рис. 2 Распределение значений микротвердости напечатанного образца АМГ5
Предел прочности испытанного листового проката АМГ5 составляет 317 ± 2 МПа. Проведенные механические испытания показали предел прочности $\sigma_b = 257 \pm 2$ МПа при деформации $32 \pm 1\%$. Мы думаем, что снижение прочности обусловлено двумя факторами. Во-первых, это выгорание магния как основного легирующего элемента. Во-вторых, это отожженное состояние в котором находится напечатанный образец после процесса электронно-лучевой проволочной аддитивной технологии.

Финансирование

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/357

**ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРА РАЗРУШЕНИЯ МНОГОСЛОЙНОЙ КОМПОЗИЦИИ
«КЕРАМИЧЕСКОЕ ПОКРЫТИЕ ZrO_2 - СВЯЗУЮЩИЙ СЛОЙ NiAl - ПОДЛОЖКА Ti-
6Al-4V» В ПРОЦЕССЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ**

Мартынов С.А., Панин А.В., Казаченок М.С., Русяев А.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

martynov@ispms.tsc.ru

Защитные покрытия на основе систем $ZrO_2 - Y_2O_3$ широко применяются в современных газотурбинных двигателях, поскольку позволяют не только существенно увеличить мощность и тягу двигателей за счет снижения температуры металлических поверхностей и увеличению эффективности сгорания топлива, но и снизить выброс NO_x . При термическом нагружении композиции «керамическое покрытие – металлическая подложка» из-за различия коэффициентов термического расширения материалов покрытия и подложки в покрытии развиваются биаксиальные растягивающие напряжения, деформирующие его таким образом, чтобы оно соответствовало размерам подложки. В свою очередь, в поверхностных слоях подложки развиваются сжимающие напряжения, релаксация которых при повышенной температуре, может приводить к росту зерен в металлической подложке, изменению элементного и фазового состава и т.п. Поэтому даже при соответствующем выборе материала связующего слоя, обладающего низким коэффициентом термического расширения и высокой коррозионной стойкостью, в процессе термоциклирования имеет место разрушение керамических покрытий. Причем характер разрушения, а также его интенсивность определяются кривизной границы раздела между керамическим покрытием и связующим слоем, а также между связующим слоем и металлической подложкой. В связи с этим, целью настоящей работы является исследовать влияние шероховатости подложки из 3D-напечатанного титанового сплава Ti-6Al-4V, а также состава и толщины связующего слоя NiAl на термическую стойкость керамических покрытий ZrO_2 в процессе термоциклирования и термоудара.

Влияние шероховатости подложки Ti-6Al-4V на интенсивность окисления связующего слоя NiAl и последующее его коробление при повышенных температурах исследовано путем анализа электронно-микроскопических изображений поверхности и боковой грани термически нагруженных образцов. Изменение микроструктуры и фазового состава покрытия, связующего слоя и подложки изучено методом рентгеновской дифракции. Методами рентгенофазового и микроэнергодисперсионного анализа исследованы структура и фазовый состав термически выращенного оксида, возникающего на границе раздела связующий слой NiAl - подложка Ti-6Al-4V» в процессе термических испытаний, Продемонстрировано влияние шероховатости подложки Ti-6Al-4V на характер растрескивания и коробления покрытий ZrO_2 , нанесенных на промежуточный слой NiAl при термоциклировании и термоударе.

Определены оптимальные значения толщины и содержания Al и Ni в связующем слое NiAl, обеспечивающие максимальное количество циклов до разрушения керамических покрытий ZrO_2 . Показано, что нанесение связующего слоя, содержащего 80% Ni и 20%Al в 10 раз увеличивает термическую стойкость покрытий ZrO_2 . Термоциклические испытания покрытий ZrO_2 , нанесенных на связующий слой NiAl, показали, что даже после 150 циклов нагрева–охлаждения не наблюдается каких-либо изменений микроструктуры ZrO_2 покрытий, их растрескивания или скалывания. Основной причиной увеличения термической стойкости ZrO_2 покрытий, нанесенных на связующий подслои NiAl, является формирование плотной пленки термически выращенного оксида алюминия на поверхности подслоя, которая препятствует диффузии кислорода к нижележащей титановой подложке. Это позволяет сохранить высокую адгезионную прочность покрытия и, соответственно, предотвратить его отслоение и скалывание.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00569.

DOI: 10.17223/9785946218412/358

**МИКРОСТРУКТУРА, ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА ИЗДЕЛИЙ ИЗ ТИТАНОВОГО СПЛАВА Ti-6Al-4V, ПОЛУЧЕННЫХ
МЕТОДАМИ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

¹Панин А.В., ²Колмаков А.Г., ³Чижик С.А. ⁴Хейфец М.Л., ⁴Чугуй Ю.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Институт металлургии и материаловедения имени А. А. Байкова РАН, Москва*

³*Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси, Минск*

⁴*ГНПО «Центр» НАН Беларуси, Минск*

⁵*Конструкторско-технологический институт научного приборостроения СО РАН,
Новосибирск*

Получение трехмерных металлических изделий методом аддитивных технологий основано на плавлении металлического порошка или проволоки лазерным или электронным лучами. При этом формирование нового слоя осуществляется как путем предварительного нанесения порошкового материала на платформу, его разравнивания с целью получения тонкого слоя и последующего его расплавления, так и путем прямой подачи порошка или проволоочного материала в ванну расплава. Достоинством электронно-лучевой плавки (англ. Electron-beam melting, EBM) является то, что данный процесс происходит в вакууме, что позволяет получать качественные изделия из титана и титановых сплавов, характеризующихся высокой химической активностью при повышенных температурах. Кроме того, структура материала, полученного в результате плавления электронным лучом порошковых смесей различного состава, часто оказывается существенно лучше, чем при использовании вневакуумных лазерных технологий (англ. Selective laser melting, SLM) В то же время, диаметр пятна электронного пучка в зоне расплава составляет 0,2-1,0 мм, что на порядок больше, чем в случае использования лазера. По этой причине по чистоте поверхности и точности изготовления электронно-лучевые технологии значительно уступают лазерным технологиям 3D-печати. В свою очередь, неоспоримым преимуществом аддитивных технологий, основанных на плавлении подаваемого проволоочного материала (англ. Electron Beam Free-Form Fabrication, EBF³), является практически 100% эффективность использования расходного материала, а также чрезвычайно высокая скорость послойного выращивания, которая достигает 2500 см³/час. В настоящей работе проведен сравнительный анализ микроструктуры образцов титанового сплава Ti-6Al-4V, полученных методами электронно-лучевой плавки и селективного лазерного плавления соответствующего порошка или проволоки, и продемонстрировано влияние микроструктуры на их деформационное поведение и механические свойства при статическом и динамическом нагружении.

Методами рентгеноструктурного анализа (Shimadzu XRD-7000), оптической (Carl Zeiss Axiovert 40 MAT) и просвечивающей дифракционной электронной микроскопии (JEM 2100) исследовали микроструктуру и фазовый состав 3D-напечатанных образцов титанового сплава Ti-6Al-4V. Анализ элементного состава образцов Ti-6Al-4V проводили на электронном микроскопе JEM-2100, оборудованном приставкой Oxford Instruments INCAx-act для микрорентгеноспектрального анализа.

Показано, что в процессе электронно-лучевого или лазерного плавления металлического порошка, нанесенного тонким (20-100 мкм) слоем на плиту построения, размер длительность существования ванны расплава, а, следовательно, степень нагрева прилегающих областей, оказываются существенно меньше, чем в случае электронно-лучевого плавления титановой проволоки, диаметром которой достигает 1 мм. Как следствие, титановые изделия, полученные EBF³ – методом обладают более крупнозернистой структурой в отличие от значительно более мелкозернистой структуры изделий, полученных методами EBM и SLM.

Изучены закономерности деформации и разрушения 3D-напечатанных образцов Ti-6Al-4V в процессе одноосного статического растяжения (INSTRON 5582) и испытаний на ударный изгиб по Шарпи (Instron 450MPX). Показано, что образцы Ti-6Al-4V, полученные EBF³ – методом, характеризуются пониженными значениями условного предела текучести и предела прочности, однако более высокой ударной вязкостью по сравнению с образцами, полученными EBM и SLM методами.

DOI: 10.17223/9785946218412/359

**HEAT TREATMENT OF TI-6AL-4V ALLOY,
MANUFACTURED BY ELECTRON-BEAM MELTING**

Pushilina N.S., Stepanova E.N., Kudiiarov V.N., Laptev R.S., Syrطانov M.S., Kashkarov E.B.
National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk

Recently, additive technologies have been actively introduced in the production of functional parts from metallic materials. The use of additive technologies allows us to speed up the production process, save metal, make lighter designs with complex geometry that cannot be made using traditional methods [1]. Recently, the direction of research related to the development of methods and approaches to additional processing of metal products manufactured using additive technologies has been actively developed [2]. One of the promising areas of such research is to conduct additional heat treatment of materials [3]. The aim of the article is to study the effect of heat treatment on the mechanical properties and rate of hydrogen absorption by the Ti-6Al-4V alloy manufactured by electron beam melting.

The manufacturing of samples was carried out on the special equipment developed and designed in Tomsk Polytechnic University. The experimental parameters were as follows: an accelerating voltage is 40 kV and melting current is 15 mA. Some samples were subjected to heat treatment. The microstructure of the samples was studied using scanning electron microscopy. The structural phase state was studied by X-ray structural analysis. The hardness of the experimental samples was measured on the KB30S using the Vickers method with loads of up to 0.5 N. The wear resistance and friction coefficient of titanium alloys were measured on the “High Temperature Tribometer”. The area of wear tracks was measured with a STIL Micromesure 3D contactless optical profilometer. The rate of hydrogen absorption was calculated during gas phase hydrogenation at 650 °C.

Analysis of the structure-phase state of the samples by X-ray structural analysis showed that in all samples α phases of titanium with a hexagonal close-packed crystal structure and β titanium with a bulk-centered crystal modification are observed. The X-ray diffraction data showed a decrease in stresses in the β phase of titanium after heat treatment. According to SEM data, there is a change in the size of the plates of the alpha phase as a result of thermal exposure. Heat treatment has a negligible effect on the wear rate of experimental samples. Additional heat treatment of EBM Ti-6Al-4V samples leads to a significant decrease in the rate of hydrogen absorption (more than 1.5 times).

Table 1. Microhardness, wear resistance.

Sample Series	Microhardness, Hv0.5	Wear rate, $10^{-3}\text{mm}^3/\text{Nm}$
EBM Ti-6Al-4V	390±10	0.62
EBM Ti-6Al-4V after heat treatment	350±10	0.58

This research was funded by Russian Science Foundation, research project No. 17-79-20100.

1. Murr L.E. Metallurgy of additive manufacturing: Examples from electron beam melting // Additive Manufacturing. 2015. V. 5. P. 40-53.
2. Longhitano G. A., Arenas M. A., Conde A., Larosa M. A., Jardini A.L., Zavaglia C.A.C., Damborenea J. J. Heat treatments effects on functionalization and corrosion behavior of Ti-6Al-4V ELI alloy made by additive manufacturing // Journal of Alloys and Compounds. 2018. 765. P. 961-968.
3. Gou J., Shen J., Hu S., Tian Y., Liang Y. Microstructure and mechanical properties of as-built and heat-treated Ti-6Al-4V alloy prepared by cold metal transfer additive manufacturing // Journal of Manufacturing Processes. 2019. Vol. 42. P. 41-50.

DOI: 10.17223/9785946218412/360

**СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ПОЛИМЕТАЛЛОВ СИСТЕМЫ Ti- Al ОСАЖДЕННЫХ
ПУТЕМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ПРОВОЛОЧНОЙ АДДИТИВНОЙ
ТЕХНОЛОГИИ**

Утяганова В.Р., Чумаевский А.В., Калашников К.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Технологии аддитивного производства на настоящее время являются достаточно перспективными, поскольку они дают возможность изготовления деталей сложной формы. Среди распространённых методов аддитивного производства, следует отметить способы подачи филамента, например, на основе проволоки и, в частности, электронно-лучевую аддитивную технологию. Одним из главных достоинств электронно-лучевой аддитивной технологии является реализация процесса в вакуумной камере, за счет которой не происходит окисления получаемого материала. Формулируя основные преимущества аддитивного производства, необходимо отметить возможность соединения нескольких материалов с постепенным изменением свойств. В последние годы соединения разнородных металлов, в особенности, таких как титан и алюминий привлекает всё больший интерес в аэрокосмической и автомобильной промышленности. В этом исследовании был разработан инновационный способ производства деталей из полиметалла системы Ti -Al, основанный на процессе электронно-лучевой аддитивной технологии.

Целью данной работы является исследование микроструктуры и микротвердости полиметаллов системы Ti-Al, полученных путем электронно-лучевой проволочной аддитивной технологии.

Для получения полиметаллов Ti-Al использовались две проволоки: проволока из титанового сплава ВТ 6 и проволока из алюминиево-магниевого сплава АМг 5. В качестве подложки использовался технический титан ВТ 1-0. Микроструктура была исследована с использованием оптической (микроскоп LEXT OLS 4100) и растровой электронной микроскопии (микроскоп Zeiss LEO EVO-50). Химический состав определялся методом энергодисперсионного анализа. Измерения микротвердости проводились на микротвердомере Duramin 5 при нагрузке 50 г.

В результате проведенных исследований было показано неравномерное распределение Ti и Al в полученных образцах Ti-Al. Важно отметить отсутствие пористости и трещин в полученных образцах Ti-Al. Микроструктурный анализ собранных данных показывает, что преимущественно на границе сплавления титанового и алюминиевого сплава происходит образование вторичных фаз α_2 -Ti₃Al. Результаты испытаний на микротвердость показывают, что в промежуточном образовавшемся слое образуются зоны с заниженными значениями микротвердости по Виккерсу.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/361

**КОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА СТАЛИ Fe-Cr-Ni-Mn-Mo-Ti, ПОЛУЧЕННОЙ
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИЕЙ ИЗ ПОРОШКОВОЙ
ПРОВОЛОКИ НА ОСНОВЕ ФЕРРИТНОЙ СТАЛИ**

Утяганова В.Р., Филиппов А.В., Калашников К.Н., Шамарин Н.Н.,
Рубцов В.Е., Колубаев Е.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Последние десятки лет активно развиваются технологии аддитивного производства и получают широкое распространение в различных производственных отраслях. Существует несколько наиболее распространенных и эффективных технологий аддитивного производства металлических изделий: селективное лазерное плавление, электродуговая и электронно-лучевая технологии. Одним из главных преимуществ электронно-лучевой технологии является осуществление процесса в вакуумной камере, за счет которого не происходит окисления по границам зерен или слоёв материала. Из литературных данных известно, что структура материала, сформированного методами аддитивного производства существенно отличается от структуры металла, полученного традиционным литьем, прокаткой или ковкой. Структурные изменения неизбежно влекут за собой изменения в механических свойствах и коррозионной стойкости металлов и сплавов, например, аустенитных коррозионно-стойких сталей. Применение стандартной проволоки не всегда является оправданным т.к. в результате направленного высокоэнергетического воздействия происходит выгорание легирующих элементов, приводящее к несоответствию материала получаемого изделия требуемому в технической документации составу. В связи с этим целесообразным является применение проволоки с откорректированным составом, для чего может быть использована порошковая проволока содержащая требуемое количество легирующих элементов. Немаловажным фактором определяющим качество изделия является материал подложки на которой формируется требуемый материал.

Целью настоящей работы является исследование коррозионной стойкости материала полученного из порошковой проволоки Fe-Cr-Ni-Mn-Mo-Ti на подложке из ферритной стали методом электронно-лучевой технологии и определение влияния термической обработки на коррозионную стойкость материала.

Для получения образцов применялась порошковая проволока состава Fe-Cr-Ni-Mn-Mo-Ti. В качестве подложки использовалась ферритная сталь, которая содержала 0,12% углерода и 1,5% марганца. Химический состав определялся методом энергодисперсионного анализа. Термическая обработка осуществлялась при температурах 900°C, 1000°C и 1100°C в течении 1 часа с последующим быстрым охлаждением в воде. Коррозионные испытания проводились путем помещения образцов в 10% раствор FeCl₃. Испытания проводились при комнатной температуре 23°C. Образцы выдерживались в растворе в течении 5 часов. После чего оценивалось состояние поверхностного рельефа методом конфокальной лазерной сканирующей микроскопии. С помощью специального программного обеспечения определялась площадь поврежденной коррозией поверхности и глубины ямок питтинга.

В результате проведенных исследований коррозионной стойкости состава Fe-Cr-Ni-Mn-Mo-Ti стали выявлено снижение коррозионной стойкости материала в области сплавления напечатанный материал/подложка. Установлено, что термическая обработка напечатанного материала при температуре 1100°C оказывает негативное влияние на его коррозионную стойкость.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/362

**ИЗГОТОВЛЕНИЕ ПОЛИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ МЕТОДОМ
АДДИТИВНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Гурьянов Д.А., Калашников К.Н., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

В настоящее время в виду развития авиационной и ракетно-космической сферы имеется необходимость в изготовлении деталей для использования в машинах и механизмах с радикально отличающимися свойствами отдельных областей изделия. В таких деталях возможна необходимость в обеспечении минимального веса при достаточно высокой трибологической стойкости поверхностей сопряжения в узлах трения. Данные обстоятельства могут быть осложнены сложностью формы изделия, трудностями крепления отдельных частей между собой и повышенные требования по герметичности корпусов.

Для обеспечения таких требований к изготавливаемым деталям из различных материалов возможно применение методики аддитивного получения материалов из разнородных металлов. В настоящее время для 3D-печати металлических материалов применяется три базовых метода, основанных на плавлении проволочного или порошкового филамента за счет лазерного луча, электрической дуги или электронного пучка. Для получения полиметаллических материалов из материалов, склонных к окислению при повышенной температуре в условиях атмосферного воздуха, возможно применение либо атмосферы защитного газа, либо вакуумной камеры. В условиях вакуума наиболее оптимальным является применение электронно-пучковой технологии, в виду её меньшей стоимости по сравнению с технологией селективного лазерного плавления.

Получение полиметаллических материалов из сталей и сплавов происходит согласованно с диаграммами состояния сплавов, имеющимися для стандартного металлургического получения отливок, но, с достаточно существенными отличиями, определяемыми локальностью метода печати проволокой и небольшим временем существования ванны расплава. В полиметаллических материалах, исследованных в работе систем - Al-Cu, Al-Ti, Cu-Ti, Fe-Cu происходит образование различных структурно-фазовых составляющих - таких, как твердые растворы, интерметаллидные соединения или механические смеси. Для материалов, изготовленных из различных пар разнородных металлов характерны индивидуальные особенности структурно-фазового взаимодействия в граничной зоне, определяемые типом образуемых фаз, параметрами процесса печати, объемом материалов компонентов, вступивших в реакцию и др. Аналогично, в каждом отдельном случае образование дефектов также проявляет индивидуальные особенности в части типов дефектов, их объемной доли и распределения. Основными дефектами являются поры, микро- и макротрещины. Возможно образование отслоений по контуру формирующихся в граничной области интерметаллидных прослоек.

Таким образом, в работе проведены исследования формирования структур материалов при аддитивном изготовлении с применением проволочной электронно-лучевой технологии.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013).

DOI: 10.17223/9785946218412/363

**ЗАКОНОМЕРНОСТИ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ПРИ
ИЗГОТОВЛЕНИИ ПОЛИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ СИСТЕМЫ "МЕДЬ-
ТИТАН" В УСЛОВИЯХ АДДИТИВНОГО ПОЛУЧЕНИЯ**

Гурьянов Д.А., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Изготовление материалов многофункционального назначения для использования в узлах двигателей и агрегатов в различных сферах промышленности ставит задачи по формированию изделий со структурой, не характерной для большинства имеющихся на настоящее время способов производства. В таких материалах может требоваться сочетание низкой массы и высокой трибологической стойкости, достигаемой, например, созданием в поверхностных слоях структуры с высокими показателями твердости металла. Одним из методов, способных дать возможность формирования деталей из сплавов на основе металлов с низкими значениями прочности - титана, алюминия или магния, является метод аддитивного получения деталей из металлических материалов. В рамках данного метода возможно получение функционально-градиентных полиметаллических материалов с легким и прочным внутренним объемом и износостойким и прочным поверхностным слоем.

В работе исследованы режимы получения и закономерности формирования структуры в полиметаллических материалах системы "медь-титан", полученных методом аддитивного электронно-лучевого изготовления с проволочным филаментом. В качестве титанового сплава использовался сплав ВТ6, медный проволочный филамент был представлен проволокой меди марки М1. Печать осуществляли на лабораторной установке в вакууме. После печати производилась вырезка образцов и исследования с применением оптической, растровой-электронной микроскопии, измерения микротвердости и механических свойств.

Проведенные исследования показывают, что при нанесении меди на заранее напечатанный металл сплава ВТ6, несмотря на достаточно низкую температуру плавления медного филамента (1083 °С) по сравнению с титаном (1668 °С), за счет большей теплоемкости меди происходит интенсивное оплавление титанового сплава. В процессе происходит интенсивное диффузионное перемешиванием меди и титанового сплава в жидком состоянии с активным фазообразованием. Формируемая на поверхности структура представлена смесью интерметаллидных фаз различного состава, меди и титана с различными твердыми растворами. Структура полученных образцов обладает существенной неоднородностью в распределении основных составляющих как в продольном, так и в поперечном направлении. Основными дефектами в структуре являлись поры и трещины различного структурно-масштабного уровня. Также в структуре присутствовало большое количество непроплавленных участков проволочного филамента или подложки. Проведенные исследования позволили подобрать необходимые для изготовления полиметаллических образцов режимы изготовления полиметаллических материалов системы "медь-титан", выявить закономерности структурно-фазовых взаимодействий и формирования дефектов при аддитивном электронно-лучевом получении.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)

DOI: 10.17223/9785946218412/364

**Трибологические свойства полиметаллов системы
"медь-титан", полученных аддитивным методом**

Гурьянов Д.А., Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Полиметаллические материалы с высокопрочным и износостойким поверхностным слоем и легкой и пластичной структурой центральных объемов представляют интерес с точки зрения создания деталей авиационного и ракетно-космического назначения. С помощью такого подхода возможно создание легких и прочных деталей с покрытием из тяжелого и износостойкого материала. На настоящее время большинство из методик аддитивного получения материалов из металлов и сплавов основаны на сплавлении с подложкой порошкового филамента, послойно наносимого на поверхность. Такая технология позволяет формировать материалы с достаточно тонкой структурой, но, неизбежно приводит к формированию пор и других дефектов, снижающих эксплуатационные свойства готового изделия. Избавиться от недостатков порошковой технологии и повысить производительность процесса аддитивного получения материалов возможно с использованием для 3D-печати проволоочного филамента. Технологии аддитивной печати материалов с использованием исходного материала в виде проволоки обладают высокой производительностью и малой дефектностью получаемых изделий. Для получения расплава в данных методах применяется как лазерный луч, так и электронный пучок. Настоящая работа направлена на изучение трибологического поведения полиметаллических образцов системы "медь-титан", полученных методом аддитивной электронно-лучевой технологии.

Образцы изготавливали на экспериментальной установке для электронно-лучевого формирования металлических изделий с использованием проволоочного филамента в Институте физики прочности и материаловедения. В работе получены образцы путем послойного нанесения на подложку из титанового сплава ВТ6 сначала аналогичного материала из проволоочного филамента титанового сплава ВТ6, затем - медного филамента из проволоки меди марки М1. Полученные образцы из данного материала подготавливали сначала путем электроискровой резки, с последующим шлифованием и полировкой. После обработки образцы испытывали на сухое трение по схеме "диск-палец" на трибометре TRIBOtechnic. Испытания проводили в паре со стальным контртелом при различных параметрах силы нормального давления и скорости скольжения.

Проведенные испытания на трения показывают, что образцы, полученные из смеси меди и титанового сплава, обладают высокой трибологической стойкостью при сухом трении в широком диапазоне. По причине высокой твердости сформировавшихся в зоне контакта титанового сплава и меди интерметаллидных соединений, данные материалы в паре со стальным контртелом демонстрируют низкие показатели объемного износа и коэффициента трения. Отслоений или трещинообразования в условиях испытания на трение обнаружено не было. Таким образом, образцы, полученные методом аддитивного электронно-лучевого производства системы "медь-титан" демонстрируют высокие показатели трибологических свойств.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)

DOI: 10.17223/9785946218412/365

**INVESTIGATION OF DEFORMATION BEHAVIOR OF SLM Ti6Al4V
SPECIMENS SUBJECTED TO TENSION**

^{1,2}Panin S.V., ¹Eremin A.V., ^{1,2}Burkov M.V., ¹Byakov A.V., ¹Pochivalov Yu.I.

¹ *Institute of strength physics and materials science, Tomsk, Russia*

² *Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

Additive technologies are promising for almost every type of industrial application from civil engineering to aerospace. The benefits include increased productivity, ease of complex shape production and low material consumption. Thus for example in aerospace different conventional parts are being replaced with ones manufactured using SLM-techniques. One of the popular materials for SLM production is Ti6Al4V which provide acceptable mechanical properties. The researchers are constantly trying to improve the performance of the structural materials and in this case it can be achieved using post-processing techniques. Conventional heat treatment and hot isostatic pressing are being used for the present time. Novel techniques to be developed can be based on ultrasonic impact treatment or processing using high energy sources (like plasma or electron beam). In order to assess the mechanical properties and investigate the deformation behavior of developed materials the testing using *in situ* optical and acoustic monitoring is often applied. The paper deals with the investigation of behavior of SLM-manufactured specimens subjected to tension. Digital image correlation using ViC-3D and acoustic emission are used *in situ* to obtain the deformation data and compare it with mechanical properties.

The Ti6Al4V specimens were manufactured by powder bed fusion technique with the height of 70 mm (along z-axis of the printer) and 10x10 mm cross-section. Then the specimens were electro-discharge machined (EDM) to obtain strips with a thickness of ~2 mm which were then subjected to post-processing. Ultrasonic impact treatment (UIT) and electron beam melting (EBM) were used in the study to improve the properties of the SLM manufactured alloy. After the treatment the dog-bone shaped specimens were EDM machined for tensile testing. In order to obtain high contrast surface for DIC the specimens were coated with spray paint speckle. The specimens were tested using electromechanical testing machine Instron 5582 with the strain rate of 0.3 mm/min with *in situ* optical and acoustic emission monitoring.

The obtained data was compared in terms of correlation of deformation data on different stages of straining. The combined plots of σ - ϵ , acoustic emission count rate and average strain calculated by DIC were constructed and studied. The mechanical properties were measured and the impact of the post-treatment was analyzed and discussed.

Acknowledgements

The work was financially supported by the Russian Federation via the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Agreement No. 05.583.21.0089, project identifier RFMEFI58318X0089).

DOI: 10.17223/9785946218412/366

**ТОПОГРАФИЧЕСКИЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СПЛАВА
Ti-Ni-Nb, СФОРМИРОВАННОГО НА TiNi ПОДЛОЖКЕ АДДИТИВНЫМ МЕТОДОМ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА**

Гудимова Е.Ю.^{1,2}, Нейман А.А.¹, Шабалина О.И.¹, Мейснер Л.Л.^{1,2}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия;

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

В настоящее время создание функциональных миниатюрных изделий размером порядка сотни микрометров является актуальным направлением в промышленности и медицине. В микроэлектронике к таким изделиям относятся актюаторы, в медицине – это имплантаты и инструменты, изготовленные из тонкостенной трубки или проволоки (стенты, корзинки, фильтры, зажимы, захваты, ловушки и пр.). Однако при разработке миниатюрного изделия необходимо учитывать, что объем поверхностной области, испытывающий максимальную деформацию в результате циклических нагрузок, сопоставим с его внутренним объемом, отвечающим за эксплуатационные характеристики конструкции в целом. В связи с этим уделяется повышенное внимание непосредственно свойствам поверхности материала. Эффективными методами улучшения физико-химических и механических свойств поверхности материала являются метод электронно-пучковой модификации, а также объединение этого метода с методами нанесения тонких покрытий из химически чистых элементов и/или композитов. Комбинация таких методов на основе аддитивных технологий позволит сформировать поверхностные сплавы с заданными структурой, морфологией поверхности, химическим составом и физико-механическими свойствами. Цель работы – изучить топографию, элементный состав и свободную энергию поверхности сплавов Ti-Ni-Nb, сформированных на TiNi подложке аддитивным методом с использованием электронного пучка.

В работе исследовались 3 группы плоских образцов TiNi сплава листового проката марки ТН1 (ООО «Промышленный центр МАТЭК-СПФ»). Химический состав сплава (вес. %): 55,54 % Ni, 0,05 % C, 0,045 % O, 0,009 % N, баланс Ti. Первая группа - образцы TiNi с исходной поверхностью после химического травления в растворе кислот 3 ч. HNO₃ + 1 ч. HF, механического шлифования на станке Saphir 550 (ATM GMBH, Германия) до «зеркального блеска» и электрохимической очистки в охлажденном до T = 273 К растворе кислот 3 ч. CH₃COOH + 1 ч. HClO₄. Вторая группа – образцы TiNi^{EB} после обработки низкоэнергетическим сильноточным электронным пучком (НСЭП) в режиме импульсного плавления: U=21 кВ, n=10. Третья группа – образцы (Ti₇₀Nb₃₀/TiNi)^{EB} с Ti-Ni-Nb поверхностным сплавом, сформированным на TiNi путем аддитивного импульсного плавления системы «Ti₇₀Nb₃₀ покрытие /TiNi подложка». Модификацию поверхности TiNi сплава проводили на установке «РИТМ-СП» в ИСЭ СО РАН, г. Томск. Исследования морфологии поверхности, элементного состава и смачиваемости были проведены на оборудовании ЦКП «Нанотех» (ИФПМ СО РАН, г. Томск, Россия) и НИ ТПУ, г. Томск, Россия.

Установлено, что поверхность исходных образцов TiNi после химико-механической очистки содержит дисперсно распределенные частицы 2-х типов: частицы размером 10 мкм соответствуют интерметаллической фазе Ti₂Ni, а частицы размером менее 2-3 мкм – карбооксидам TiC(O). Суммарное содержание кислорода и углерода в поверхностном слое по данным РЭМ/ВДС составляет не более 10 ат. %. Отношение Ti:Ni без учета вклада примесных элементов близко к эквиатомному составу и составляет 50,3:49,7 (ат.%).

НСЭП обработка в режиме импульсного плавления приводит к полному удалению неметаллических включений, однако на поверхности образцов TiNi^{EB} наблюдается наличие типичных микрократеров, формирование которых инициируется частицами второй фазы Ti₂Ni (Ti₄Ni₂O). Подробно механизм формирования кратеров в результате электронно-пучковой

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

обработки описан в [1]. Значение средней шероховатости поверхности, полученное с площади 15×15 мкм, составляет $R_a(\text{TiNi}^{\text{EB}}) = 7,1 \pm 0,2$ нм, что в ~ 4 раза раз меньше значения для исходной поверхности – $R_a(\text{TiNi}) = 31,1 \pm 0,5$ нм. Концентрация углерода и кислорода в образцах TiNi^{EB} уменьшилась более чем в 2 раза и ниже порога детектирования. Отношение Ti:Ni составляет 53:47 (ат. %). Следует отметить, что обеднение поверхностного слоя толщиной 0,5 мкм по никелю в образцах TiNi^{EB} связано с его селективным испарением в результате электронно-пучковой обработки.

Аддитивное плавление электронным пучком системы «Ti-Nb покрытия/TiNi подложка» приводит к формированию поверхностного сплава, характеризующегося морфологически однородным рельефом с небольшим содержанием единичных микрократеров, которые наследуются в результате предварительной НСЭП обработки. По данным РЭМ/ВДС в поверхностной области образцов $(\text{Ti}_{70}\text{Nb}_{30}/\text{TiNi})^{\text{EB}}$ не выявлено наличие углерода, концентрация кислорода ниже порога детектирования, распределение Ti, Ni и Nb в бескратерных областях однородно по поверхности и соответствуют составу $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{27}\text{Nb}_{20}$ (ат. %).

В таблице 1 представлены значения краевых углов смачивания и свободной энергии поверхности образцов TiNi сплава до и после модификации поверхности. Как видно, для исходных образцов TiNi контактный угол $\theta_w < 90^\circ$, что свидетельствует о гидрофильности поверхности. Значение СЭП составляет $\sigma(\text{TiNi}) = 21,37 \pm 0,64$ мДж/м². Кроме того, полярная составляющая СЭП в данных образцах в 2 раза больше дисперсионной. После НСЭП обработки контактные углы смачивания увеличиваются. Угол $\theta_w(\text{TiNi}^{\text{EB}}) > 90^\circ$, то есть поверхность приобретает гидрофобные свойства. Значение свободной энергии уменьшается относительно значения для исходного образца TiNi. Наблюдается перераспределение вкладов от составляющих СЭП. Формирование Ti-Ni-Nb поверхностного сплава на подложке TiNi привело к существенному изменению величины свободной энергии поверхности. Данная поверхность характеризуется наибольшим значением СЭП $\sigma((\text{Ti}_{70}\text{Nb}_{30}/\text{TiNi})^{\text{EB}}) = 26,82 \pm 0,9$ мДж/м². Важно отметить, что полярный вклад в энергию составляет всего 4% и при контакте жидкости с поверхностью образцов $(\text{Ti}_{70}\text{Nb}_{30}/\text{TiNi})^{\text{EB}}$ будут преобладать силы Ван-дер-Ваальса и другие неспецифические виды взаимодействия.

Таблица 1

Значения краевых углов смачивания и свободной энергии поверхности образцов TiNi сплава до и после модификации поверхности

Образец	θ_w , град.	θ_g , град.	σ , мДж/м ²	σ^I , мДж/м ²	σ^{II} , мДж/м ²
TiNi	$85,3 \pm 0,9$	$82,6 \pm 1,41$	$21,37 \pm 0,64$	$7,48 \pm 0,32$	$13,89 \pm 0,32$
TiNi^{EB}	$91,7 \pm 1,50$	$84,9 \pm 1,62$	$18,8 \pm 0,78$	$11,18 \pm 0,47$	$7,62 \pm 0,31$
$\text{Ti}_{70}\text{Nb}_{30}/\text{TiNi}$	$89,6 \pm 1,27$	$76,0 \pm 1,69$	$26,82 \pm 0,9$	$22,77 \pm 0,68$	$4,05 \pm 0,22$

Исследования проводились при финансовой поддержке РФФИ, проект №18-19-00198 (от 26.04.2018).

1. Meisner L.L., Markov A.B., Proskurovsky D.I., and et.al. Effect of inclusions on cratering behavior in TiNi shape memory alloys irradiated with a low-energy, high-current electron beam // Surface & Coatings Technology. – 2016. – Vol. 302. – P.495–506

DOI: 10.17223/9785946218412/367

АДДИТИВНОЕ ВЫРАЩИВАНИЕ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

¹Доненко И.Л., ¹Доненко А.В., ²Лукьяненко В.А.

¹МБОУ «Ореховская средняя школа», Сакский р-н, с. Орехово

²Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь

Современная промышленность требует все более быстрых решений различных технических вопросов. Одним из таких вопросов является рост кристаллических структур. Мы предлагаем заменить существующие устои в рамках роста кристаллов.

В данной работе предлагается новый способ роста кристаллов. Он заключается в получении фрактальных дифракционных картин и посредством вычисления высших интенсивностей картины – моделирование 3D структуры фотонных кристаллов.



Рис.1 Дифрактал ковра Серпинского с шагом решетки в длину Талбота

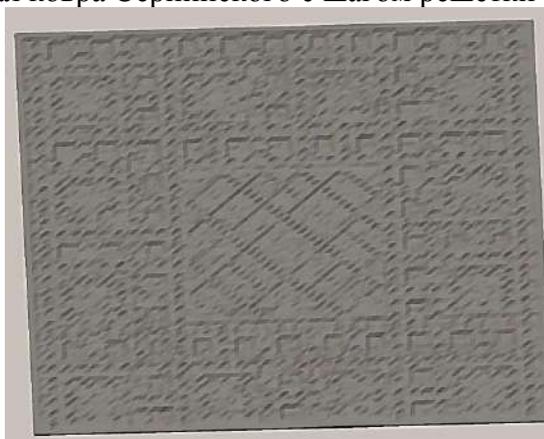


Рис. 2. Фотонный кристалл

При моделировании фотонных кристаллов с высокой точностью восстановления структуры, используется 120-150 итераций дифракционных структур для корректировки погрешностей, вызванных абберациями и другими оптическими помехи при моделировании, что считается по формуле:

$$I(D) = \frac{1}{2} r^\lambda,$$

где I- интенсивность лазерного излучения, D – фрактальная размерность, r – фокусное расстояние микрообъектива, λ - длина волны.

Данные фотонные кристаллы очень легко изготовить физически – они печатаются посредством 3D принтера. Применение их также очень широко от новеших типов дисплеев до радио отражающих поверхностей различной авиатехники.

1. Доненко А.В. Математическое моделирование для решения краевой задачи эволюции фрактальных отображений световых полей / А.В. Доненко, В.А.Лукьяненко, И.Л. Доненко. Виртуальное моделирование, прототипирование и промышленный дизайн 2018. С. 436-442.

DOI: 10.17223/9785946218412/368

**ON THE FATIGUE BEHAVIOR OF SLM Ti6Al4V
SPECIMENS: DIC AND FRACTOGRAPHIC STUDY**

^{1,2}Panin S.V., ¹Eremin A.V., ^{1,2}Burkov M.V., ¹Lyubutin P.S., ¹Byakov A.V., ¹Pochivalov Yu.I.

¹*Institute of strength physics and materials science, Tomsk, Russia*

²*Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

Additive technologies will bring a significant effect on the basic manufacturing principles in all industries. This new approach significantly increase production efficiency due to reducing material consumption and direct transfer of the 3D CAD model to the final item excluding intermediary stages. But additive manufacturing has critical disadvantages, among them are internal defects such as unfused zones and high surface roughness. These lead to the additional post-production activities and also drastically reduce fatigue properties of the structures. Nowadays the prospective treatment techniques are thermal treatment, hot isostatic pressing. The other methods that are not widely spread, but at the same time improve the material properties are ultrasonic impact treatment and processing using high energy irradiation (ion or electron beam, plasma flow), which directly effects the surface roughness and hardness.

The paper aims at the investigation of the effect of ultrasonic impact treatment and electron surface beam processing on the fatigue behavior of Ti6Al4V SLM specimen. The behavior of the specimen was characterized by means of in situ DIC technique and analysis of fracture surfaces observed using scanning electron microscope.

The Ti6Al4V items were manufactured by powder bed fusion technique. The initial blanks have the height of 70 mm (parallel to the building direction) and 10x10 mm cross-section. Then they were electro-discharge machined (EDM) to obtain specimens with continuous radius between ends with a thickness of ~2 mm which were then subjected to post-processing treatment. These final specimens in initial state and after two treatment types were subjected to cyclic loading under the frequency of 20 Hz in servo-hydraulic testing machine. Before the crack initiates the images for DIC processing were captured every 2000 cycles, but when the crack appear the image acquisition performs every 50 cycles. During the test it was obtained pair of specimen photos at minimum load in the cycle and at maximum load in the cycle – this pair then were processed using DIC in order to calculate the crack tip position and stress intensity factor using Williams approximation, strain at the crack tip and changes in specimen compliance during crack growth.

Acknowledgements

The work was financially supported by the Russian Federation via the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Agreement No. 05.583.21.0089, project identifier RFMEFI58318X0089).

DOI: 10.17223/9785946218412/369

**ОСОБЕННОСТИ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МАТЕРИАЛА ПРИ
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОМ АДДИТИВНОМ ИЗГОТОВЛЕНИИ ДЕТАЛЕЙ ИЗ
ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ**

Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Аддитивное получение деталей из металлических материалов является актуальной задачей для современной авиационной и ракетно-космической сферы. Это связано с широкой применимостью легких и прочных титановых сплавов для изготовления различных крупногабаритных изделий, для чего в настоящее время применяется ряд классических методик, основанных на обработке заготовок с получением большого количества отходов в виде стружки. Одним из наиболее производительных методов 3D-печати металлических материалов из металлов и сплавов, требующих для изготовления деталей отсутствия окисления и, соответственно, вакуумной среды - является электронно-лучевая технология с использованием проволочного филамента. Данная технология опережает технологию лазерного плавления по стоимости источника тепловового воздействия на филамент, опережает технологии, основанные на порошковом филаменте по производительности и опережает технологии, основанные на применении электрической дуги по качеству полученного материала. Одним из положительных качеств материала, получаемого методами аддитивного производства из металлических материалов, и одновременно его негативным свойством, является литое, дендритное строение полученного изделия с четко выраженной направленностью роста дендритов в вертикальном направлении относительно направления роста изделия. Такое положение приводит к формированию структуры с высокой пластичностью и анизотропией свойств, но при этом сравнительно низкой прочностью в сравнении со структурами с малым размером зерна после механической обработки или прокатки. Работа посвящена исследованию макроскопических закономерностей формирования структуры с направленным ростом при аддитивном получении деталей из титанового сплава ВТ6 методом электронно-лучевой аддитивной технологии.

Образцы в форме вертикально выращенных "стенок" длиной 100 мм, шириной 6 мм и высотой до 60 мм изготовлены на лабораторной установке для электронно-лучевой аддитивной наплавки. С помощью управления параметрами процесса изготовления образцов планировалось управление полученной структурой деталей. Регулировались ток пучка и скорость подачи проволоки и образца в широких пределах. В качестве филамента для производства образцов использовалась проволока из сплава ВТ6 диаметром 1,2 мм. В качестве подложки использовался листовой прокат сплава ВТ6 в состоянии поставки. Подложка устанавливалась на охлаждаемом медном столе и фиксировалась с помощью прижимов.

Нанесение на подложку титанового сплава ВТ6 сопровождалось частичным оплавлением материала и формированием в граничной зоне достаточно мелкокристаллической зеренной структуры. Поверхность образца формируется волнистой формы согласованно со слоистостью структуры образцов. При дальнейшем нанесении металлического материала происходит увеличение размера растущих дендритов, которые растут вертикально относительно формируемого образца. Дендриты, формируемые в образце, могут расти через большое количество слоёв материала, вплоть до 30-40 слоев. Регулирование параметров процесса печати при охлаждении детали позволило формировать образцы с различным строением зеренной структуры, с большим, или меньшим размером дендритов, а также с практически зерненным мелкокристаллическим строением. При этом в образцах с дендритным строением общая тенденция эпитаксиального роста сохранялась. Таким образом, изготовление деталей с направленным строением зеренной структуры при отводе тепла в условиях охлаждаемого стола возможно при различных параметрах изготовления и габаритов образцов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/370

**ФОРМИРОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗЦОВ, ПОЛУЧЕННЫХ
МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Изготовление сложной формы из металлических материалов является одной из наиболее актуальных задач в современной авиационной и ракетно-космической сфере. Основными методиками получения деталей являются основанные на снятии стружки с заготовок или получении аддитивно, путем послойного добавления материала. При этом в условиях получения деталей аддитивным методом из различных видов филамента возможно формирование тех или иных видов дефектов, являющихся специфическими для данных видов производства и существенно зависящих как от выбранного способа подвода материала в зону сплавления, так и от метода создания ванны расплава. На настоящее время наиболее развитыми в литературе являются методики, основанные на внедрении в зону сплавления порошкового филамента. Технологии, основанные на внедрении в зону сплавления проволочного филамента, находят несколько меньшее применение, хотя обладают большей производительностью. Настоящая работа посвящена сравнительному описанию дефектов, формируемых при аддитивном электронно-лучевом производстве деталей из различных металлов и сплавов методом электронно-лучевого сплавления в вакууме.

В работе производилось изготовление моно- и полиметаллических изделий из сплавов ВТ6, АМг5, М1, стали 12Х18Н9Т и др. В качестве полиметаллов выбраны пары из сплавов на основе разнородных металлов в соединении образующих системы Cu-Al, Fe-Ti, Fe-Cu, Ti-Al и Ti-Cu. После получения материалов с разнородной структурой производились исследования методами оптической и растровой электронной микроскопии на микроскопах Altami Met 1С и Zeiss LEO EVO 50.

Проведенные исследования показывают, что в зависимости от режимов изготовления материалов с монометаллическим строением основным элементом формируемых дефектов являются поры. При несоответствии параметров электронного пучка или необходимой скорости подачи образца возможно формирование макроскопических неоднородностей строения образцов. Наиболее подвержен образованию пор в структуре алюминиевый сплав АМг5. Наименьшее количество пор наблюдается в стали 12Х18Н9Т. Среднее количество пор характерно для титанового сплава ВТ6 и меди М1.

При изготовлении полиметаллических материалов системы Fe-Cu (то есть материалов, образующих в контакте только механические смеси и не формирующих интерметаллидных фаз) основными структурными дефектами в граничной зоне являются макроскопические структурные неоднородности и нарушения геометрии образцов. В образцах полиметаллов системы Cu-Al, Ti-Al, Fe-Ti и Ti-Cu помимо пор и частиц интерметаллидных фаз происходит образование крупных интерметаллидных прослоек и формирование трещин различного структурно-масштабного уровня. Формирование трещин происходит или внутри интерметаллидных частиц и прослоек, или путем расслоения по границам последних. Образование пор в образцах полиметаллов происходит схожим образом с аналогичным процессом при печати монометаллических образцов. Дополнительным видом дефектов в полиметаллических образцах, возникающем при существенном несоответствии параметров процесса получения образцов необходимым значениям, являются частицы не проплавленной проволоки в структуре образцов и вплавленных в поверхностные слои.

Проведенные сравнительные исследования показывают, что в образцах и поли- и монометаллических деталей, изготовленных методом проволочной аддитивной электронно-лучевой технологии, формируются поры и нарушения геометрии образцов. В образцах полиметаллов помимо вышеуказанных дефектов происходит образование трещин и неоднородностей распределения элементов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/371

**ФОРМИРОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОМ АДДИТИВНОМ
ИЗГОТОВЛЕНИИ ТИТАНОВЫХ ОБРАЗЦОВ**

Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Получение деталей из титановых сплавов методами аддитивного электронно-лучевого производства является актуальной задачей для получения крупногабаритных деталей, необходимых для авиационной и ракетно-космической сферы. Такая задача появляется в виду необходимости в создании деталей большими линейными размерами, при этом не используя классические методы, основанные на снятии стружки, приводящие к высокой степени расхода материала. Благодаря применению электронно-лучевой технологии возможно получение деталей аддитивным методом с высокой производительностью и малым количеством дефектов с прочностными параметрами, соответствующими прочности металла в литом состоянии. При этом на настоящее время в современной литературе мало описаны дефекты, формируемые при данном процессе, и не описаны причины их появления и методы борьбы с их возникновением. Настоящая работа посвящена исследованиям образования дефектов в образцах, полученных из сплава ВТ6 методом электронно-лучевой печати в вакууме.

Изготовление образцов производилось при различном токе пучка, напряжении 30 кВ, различных параметров скорости подачи образца при печати и скорости подачи проволоки. В качестве филамента выбрана проволока сплава ВТ6 толщиной 1,2 мм. В качестве подложки использован листовой прокат сплава ВТ6 в состоянии поставки, устанавливаемый на охлаждаемом медном столе с помощью прижимов. После проведения изготовления образцов производилась вырезка металлографических образцов на электроискровом станке с дальнейшей их полировкой и травлением для исследования структуры методом оптической микроскопии.

Проведенные исследования показали, что при несоответствии значений параметров режимов оптимальным значениям происходит формирование дефектов различного структурно-масштабного уровня. Во внутреннем объеме образцов происходит образование различных пор, в основном в зоне между слоёв нанесенного металла, поры могут быть размером от нескольких микрометров до десятых долей миллиметров и более. На поверхности при недостаточном проплавлении проволоки в зоне печати возможно образование приплавленных частей проволоки. При недостаточной точности позиционирования проволоки возможно формирование дефектов в виде неровностей образцов на макроуровне, приводящих к нарушению макрогеометрии образца и несоответствию формы полученного изделия ранее заданной.

Таким образом, при различных отклонениях процесса печати образцов возможно образование как дефектов внутреннего строения, так и поверхностных дефектов, а при нарушении позиционирования проволоки и образца при печати возможно нарушение макрогеометрии образцов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/372

**ПОЛУЧЕНИЕ ОБРАЗЦОВ ИЗ СТАЛИ И ТИТАНОВОГО СПЛАВА МЕТОДОМ
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Получение металлических материалов с помощью 3D-печати в последнее время набирает всё большую популярность. Данное явление обусловлено необходимостью ресурсосбережения, получения деталей сложной формы и больших габаритов в различных отраслях техники и промышленности. Основные методы получения металлических материалов с помощью 3D-печати основаны на использовании порошковых или проволоочных материалов и лазерной, электронно-лучевой или электродуговой методик расплавления материала в зоне печати. Одной из наименее изученных с точки зрения формируемой структуры и структурно-фазового приспособления материала в условиях печати является проволоочная электронно-лучевая технология получения материала. В условиях данной технологии с осуществлением процесса печати в вакууме возможно получение широкого спектра материалов с практически неограниченным типоразмером и номенклатурой материалов. В данном процессе существенную роль в формировании структуры материала и различного вида дефектов играет тип печатаемого материала, его температура плавления, наличие полиморфизма, вторичных фаз и др. Печать различных по структуре материалов может приводить к различным параметрам получаемой зеренной структуры и различному структурному отклику материалов на смену значений параметров режимов получения образцов. Для получения данных о характерных особенностях получения материалов с различной структурой в настоящей работе проведены исследования закономерностей 3D-печати стали 12X18H9T и титанового сплава ВТ6 методом электронно-лучевого плавления проволоочного филамента в вакууме.

Образцы получены на лабораторной установке для аддитивного получения в ИФПМ СО РАН. Образцы получены печатью в вакууме в виде "стенок" длиной 100 мм, толщиной до 6 мм и высотой до 60 мм. Из полученных образцов вырезались лабораторные образцы для определения прочностных параметров и металлографические шлифы для определения закономерностей формирования структуры. Исследования механических свойств производились на универсальной испытательной машине УТС 110М. Металлографические исследования проводили на оптическом микроскопе Altami MET 1С.

Проведенные исследования показывают, что средний размер зерен в образцах титанового сплава после электронно-лучевого аддитивного изготовления существенно выше, чем при печати стали 12X18H9T. На поверхности напечатанных образцов титанового сплава четко выделяются зерна, проходящие через большое число слоёв напечатанного материала. В структуре титанового сплава преобладают зерна с четко выраженным наличием мартенситной игольчатой структуры. В образцах выражено наличие пор, в основном между слоями нанесенного металла. На поверхности четко выделяется волнистость строения в образцах обоих материалов. В стальных образцах меньшее количество пор и более мелкодисперсное строение дендритной структуры. Механические свойства и стали и титанового сплава после 3D-печати соответствуют свойствам литого металла. В стали в направлении осуществления процесса печати происходит вытягивание дендритов, в титановом сплаве рост дендритов осуществляется вертикально вверх.

Таким образом, свойства материалов определяют характерные особенности строения зеренной структуры, такие, как средний размер зерна, направление роста или пористость. Механические свойства при этом у обоих материалов находятся на уровне литого металла.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/373

**ВЗАИМОСВЯЗЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ОБРАЗЦЫ СТАЛИ
12X18H9T И ПОЛУЧЕННОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОМ
АДДИТИВНОМ ПОЛУЧЕНИИ**

Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Производство металлических деталей сложной конфигурации в последние годы является одной из наиболее актуальных задач современного машиностроения. С помощью технологий 3D-печати возможно изготовление широкого спектра деталей для различных узлов и агрегатов, работающих в различных условиях. Для их получения применяется ряд аддитивных технологий, основанных в общем виде на принципах подвода филамента в зону сплавления и его нагрева с помощью различных источников. На воздухе или в защитной атмосфере возможно применение лазерного или дугового источников нагрева, в вакууме возможно также применение электронного пучка для получения ванны расплава. В качестве филамента возможно применение как металлической проволоки, так и различных порошковых материалов. При этом данные методы имеют как различные преимущества, так и различные недостатки по сравнению с аналогами. Например, при печати с помощью проволочного филамента возможно как получение деталей с более высокой производительностью, так и снижение качества поверхности деталей, требующее проведения различных постобработок. Для порошковых филаментов характерна меньшая производительность и практически неизбежное наличие пор. Применение электронно-пучковой технологии для формирования ванны расплава позволяет повысить качество получаемого материала после аддитивного производства, но требует применения вакуумной камеры для получения деталей. Настоящая работа посвящена процессу аддитивного получения стали 12X18H9T методом электронно-лучевой аддитивной технологии с проволочным филаментом, позволяющим получать детали из металлических материалов с наибольшей производительностью с высоким качеством получаемого материала. При этом для получения материалов методом электронно-лучевой технологии необходимо наличие экспериментального материала по влиянию на структурные и структурно-фазовые изменения материала, полученного при печати, параметров процесса аддитивного получения, обуславливающих энергетическое воздействие на материал, приводящее к его расплавлению и соединению с подложкой.

В работе производилось получение образцов из стали 12X18H9T методом аддитивного электронно-лучевого производства на лабораторной установке в Институте физики прочности и материаловедения. Основными параметрами, регулируемые в работе, являлись ускоряющее напряжение электронного пучка, ток пучка, тип и частота развертки, скорость подачи образца и филамента и наличие охлаждения стола. Основным регулируемым параметром являлся ток пучка, мА. Ускоряющее напряжение составляло 30 кВ. Скорость подачи образца и проволоки подбиралась эмпирически с точки зрения стабилизации процесса печати при соответствующих параметрах. После проведения изготовления образцов из них вырезались металлографические шлифы и образцы для механических испытаний на электроискровом станке.

Исследования структуры образцов, полученных в различных режимах показывают, что структура стали представлена аустенитным зерном с наличием небольшого количества ОЦК-фазы в виде остаточного δ -феррита. Средний размер зерна в образцах незначительно изменяется при изменении параметров процесса производства. Независимо от режимов изготовления образцов объемная доля остаточного феррита находится на достаточно низком уровне. Механические свойства образцов также мало зависят от тока пучка при получении в образцах, находятся на уровне литой стали 12X18H9T с пределом прочности порядка 530 МПа. Общим результатом проведения работ является достаточно высокая прочность образцов и сравнительно небольшие структурные отличия образцов, полученных из исследованной аустенитной стали при изготовлении образцов в условиях, обеспечивающих стабильность формы и геометрии образцов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/374

**МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СТРУКТУРА ТИТАНОВЫХ ОБРАЗЦОВ,
ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ПАРАМЕТРАХ РЕЖИМОВ ЭЛЕКТРОННО-
ЛУЧЕВОЙ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Производство деталей сложной формы из легких и прочных сплавов на основе титана для авиационной и ракетно-космической сферы является одной из наиболее актуальных задач современного машиностроения в виду интенсивного развития данных областей техники. Одним из наиболее производительных методов, позволяющих изготавливать детали из титановых сплавов в вакууме является электронно-лучевая технология с проволочным филаментом. С помощью данной технологии изготавливаются детали различного и практически неограниченного размера со структурой и механическими свойствами литого металла. На настоящее время в современной литературе имеется недостаточное количество сведений о влиянии энергетического воздействия при 3D-печати на структуру и механические свойства образцов титанового сплава ВТ6, полученных аддитивным методом. При этом в условиях изменения параметров ускоряющего напряжения или тока пучка энергетическое воздействие на материал расплавляемой проволоки и подложки может существенно изменяться и приводить к существенным изменениям в структуре и свойствах. Также немаловажным является наличие или отсутствие охлаждения подложки в процессе печати, обуславливающее большие или меньшие скорости отвода тепла при печати. В настоящей работе проведены исследования взаимосвязи структуры и свойств сплава ВТ6 после изготовления аддитивным методом.

В работе производилась печать образцов в форме "стенок" высотой до 60-80 мм, длиной до 100-120 мм и шириной до 6-8 мм из проволочного филамента титанового сплава ВТ6 диаметром 1,2 мм. В процессе изготовления образцов производилось регулирование тока пучка в широких пределах. Ускоряющее напряжение составляло 30 кВ. Скорость подачи проволоки и относительного движения образцов относительно проволоки подбирались эмпирически. Из экспериментальных образцов вырезались лабораторные образцы для определения прочностных показателей и металлографические шлифы для исследования внутренней структуры металла при изготовлении, рентгеноструктурного анализа и растровой электронной микроскопии.

Полученные образцы из титанового сплава ВТ6 после изготовления методом аддитивного электронно-пучкового нанесения проволочным филаментом обладают на поверхности ярко выраженной волнистостью, коррелирующей с их слоистой структурой, что обусловлено методикой и этапностью нанесения материала при печати. В структуре преобладает дендритное строение и α -фаза. Размер зерен, формирующихся ростом дендритов, существенный, часть зерен (дендритов) располагается от первого до последнего слоя, нанесенного на подложку. При увеличении или уменьшении тока пучка общий характер формируемой структуры с ярко выраженным направленным строением и большим размером зерен сохраняется, но в ряде случаев происходит уменьшение среднего размера зерна, что при этом слабо сказывается на механических свойствах. Предел прочности образцов в зависимости от режима изготовления может изменяться в пределах 10-15% от среднего значения порядка 860-870 МПа. В условиях проведенных исследований влияние параметров процесса изготовления деталей прослеживалось в изменениях размера зерна и некоторого снижения прочности при отклонении тока пучка от оптимального для заданных условий значения.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/375

**ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ОБРАЗЦОВ СПЛАВА ВТ6, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОГО ПРОИЗВОДСТВА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА**

Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Производство деталей из титановых сплавов методом аддитивного производства является одной из наиболее актуальных задач, имеющих в области материаловедения на настоящее время. Это обусловлено растущей потребностью в легких и прочных материалах авиационного и ракетно-космического назначения, способных в изделии принимать любую по сложности форму и габариты. Одной из наиболее производительных технологий получения таких материалов, требующих из-за высокой склонности к окислению в атмосферных условиях вакуума или защитной атмосферы, является методика электронно-лучевого изготовления деталей проволочным филаментом. Так как для формирования электронного пучка требуется наличие вакуумной среды, то печать титановых сплавов для данного процесса производства не вносит дополнительных ограничений. Применение проволочного филамента обуславливает помимо высокой производительности метода производства низкую пористость поверхности и внутреннего объема напечатанного материала. Как показывают проводимые испытания в образцах полученных данным методом из титанового сплава ВТ6 имеет место ярко выраженная направленность роста зерен относительно направления печати, что приводит к формированию в образцах столбчатой структуры с вертикальным расположением зерен. Такое положение оказывает существенное влияние на процесс деформации и разрушения образцов в продольном относительно таких зерен и поперечном направлении. Выявлению особенностей пластической деформации и разрушения образцов от приложенной нагрузки в направлении вдоль и поперек зерен посвящена настоящая работа.

Образцы изготавливали методом электронно-лучевого аддитивного получения с проволочным филаментом на лабораторной установке в Институте физики прочности и материаловедения. В качестве подложки использовался листовой прокат сплава ВТ6 в состоянии поставки. Подложка устанавливалась на охлаждаемом медном столе с помощью прижимов. Регулирование параметров электронного пучка и подачи проволоки или образца производилось в широких пределах для установления наиболее оптимальных значений с точки зрения стабильности процесса печати и качества образцов. Образцы изготавливались плоской формы высотой до 80 мм, толщиной до 6 мм и длиной до 120 мм. Из экспериментальных образцов электроискровым методом вырезались лабораторные образцы для определения прочностных показателей и металлографические шлифы для изучения закономерностей формирования структуры после печати. Образцы для механических испытаний вырезали таким образом, чтобы в рабочей части расположение дендритов было или продольным относительно образца или поперечным. Механические испытания проводили на одноосное растяжение на универсальной испытательной машине УТС 110М.

Проведенные механические испытания образцов титанового сплава ВТ6 на растяжение показывают, что влияние структуры металла в виде вытянутых зерен сказывается как на особенностях пластической деформации и разрушения, так и на значениях основных механических свойств. Образцы с расположением зерен вдоль лопаток демонстрировали большие значения предела прочности при испытаниях, в среднем составляющие порядка 870 МПа. Образцы, вырезанные поперек зерен, демонстрировали предел прочности на величину вплоть до 5-10% меньшую в сравнении с предыдущим типом образцов, но также демонстрировали и в среднем меньшие значения относительного удлинения при разрыве. Фрактография поверхности разрушения образцов, вырезанных вдоль зерен, показывает ямочный вязкий характер излома, в то время как у образцов, вырезанных поперек зерен, имеет место и межзеренное разрушение. Таким образом, влияние структуры титановых образцов на механические свойства прослеживается в виде изменения прочности, пластичности и закономерностей деформации и разрушения в зависимости от направления приложения нагружающего усилия при испытаниях.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

DOI: 10.17223/9785946218412/376

**ФОРМИРОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ ПРИ АДДИТИВНОМ ИЗГОТОВЛЕНИИ
ПОЛИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ СИСТЕМЫ МЕДЬ-АЛЮМИНИЙ**

Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Полиметаллические материалы системы медь-алюминий имеют востребованность как с точки зрения формирования соединений с целью обеспечения электроконтакта, так и в конструкционных целях и, что не менее важно, в триботехнических целях для создания узлов трения в машинах и механизмах. С помощью получения в поверхностных слоях сложной смеси интерметаллидных фаз и твердых растворов возможно получение достаточно легких деталей с износостойким и прочным поверхностным слоем, что имеет свою применимость прежде всего в авиационной и ракетно-космической сферах. Основание методики получения таких деталей на настоящее время основано на применении порошковой технологии, обладающей рядом недостатков, к которым можно отнести прежде всего низкую производительность и высокую пористость получаемых изделий, а также необходимость получения достаточно мелкодисперсного исходного сырья. Проволочная технология лишена данных недостатков, но на настоящее время менее разработана как на техническом, так и на фундаментальном уровнях. При использовании проволочного филамента вместо вышеуказанных проблем порошковой технологии на первое место выходят проблемы с точностью позиционирования проволоки и образца, возможность из-за неточностей позиционирования потери макрогеометрии изделия, существенно большее время существования ванны расплава и др. Изучению дефектов в образцах, возникающих из-за различных причин при изготовлении деталей системы Al-Cu методом аддитивного электронно-лучевого производства, посвящена настоящая работа.

Процесс аддитивного получения композитов системы Al-Cu проводился на экспериментальном оборудовании в Институте физики прочности и материаловедения. В качестве подложки использовался листовой прокат алюминиевого сплава АМг5 в состоянии поставки, установленный на медном охлаждаемом столе с помощью прижимов. На подложку изначально наносился из проволочного филамента алюминиевый сплав АМг5 (проволока диаметром 1,2 мм), затем - медь марки М1 (филамент - проволока диаметром 1,2 мм). Развертка электронного пучка формировалась таким образом, чтобы одновременно обеспечивать задачу расплавления проволоки и разогрева подложки.

В процессе печати при определенном соотношении параметров процесса и при недостаточном прогреве проволоки происходило не расплавление всей её части в зоне печати, а отделение частей проволоки с их сплавлением с подложкой. В результате в структуре формировались различные поры в медной и граничной частях образца и не проплавленные частицы медной проволоки. При этом тепловое воздействие хотя и не было достаточным для того, чтобы расплавить проволоку, но при этом способствовало значительной диффузии алюминия вглубь медных частиц с образованием твердых растворов алюминия в меди и интерметаллидных фаз по контуру частиц.

При ином отличии параметров от оптимального значения в процессе печати медным филаментом избыточное тепло, вносимое медью, приводило к нарушению макроскопического равновесия в образце и нарушению макрогеометрии с образованием обширных зон твердых растворов и интерметаллидных соединений. В зоне образования интерметаллидных фаз в большом количестве образуются трещины различного структурно-масштабного уровня, обуславливающие низкие механические свойства материала.

Таким образом, при отклонении от оптимальных значений параметров режима аддитивного получения образцов системы медь-алюминий в сторону недостаточного теплового вложения происходит образование пор и не проплавленных областей в граничной зоне, при отклонении в сторону избыточного теплового вложения происходит интенсивное образование интерметаллидов и образование большого числа трещин различного масштабного уровня.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)

DOI: 10.17223/9785946218412/377

**ОБРАЗОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ ПРИ ИЗГОТОВЛЕНИИ ПОЛИМЕТАЛЛОВ МЕДЬ-
ТИТАН ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВЫМ МЕТОДОМ**

Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Изготовление материалов из легких и прочных сплавов с износостойким поверхностным слоем является важной задачей с точки зрения авиационного и ракетно-космического машиностроения. Для данных целей в настоящее время возможно применение широкого спектра аддитивных технологий, основанных как на порошковом, так и на проволочном методе внесения филамента в зону печати. Следует отметить, что при возможном в дальнейшем развитии технологии, появится задача создания упрочненного трибологического поверхностного слоя на телах вращения, что практически недостижимо методами порошкового нанесения и может быть получено с применением проволочной технологии, что делает её более перспективной для данной цели. Одним из наиболее перспективных методов сообщения материалу теплового воздействия с точки зрения качества материала и печати в вакууме (необходимом для титановых сплавов) является электронно-лучевая технология. Данная технология позволяет изготавливать детали различной и практически неограниченной формы и размеров из большого спектра материалов. Но при печати проволочным филаментом в образцах возможно образование дефектов различного структурно-масштабного уровня в зависимости от степени несоответствия параметров процесса печати оптимальным значениям. Исследованиям дефектов, формируемых при аддитивном электронно-лучевом нанесении полиметаллических материалов системы Cu-Ti на титановую подложку, посвящена настоящая работа.

Образцы для исследований структуры и образующихся в ней дефектов изготавливали на лабораторном оборудовании для аддитивного получения металлических материалов в Институте физики прочности и материаловедения. В качестве подложки использован листовой прокат титанового сплава ВТ6, в качестве филаментов сплав ВТ6 и медь марки М1. На подложку изначально наносился титановый сплав, на котором производилась печать медью. Образцы получали как в оптимальных, эмпирически определенных режимах, так и в условиях недогрева филамента или перегрева подложки при печати, что способствовало формированию дефектов различного типа. Образцы после проведения печати исследовали путем вырезки металлографических шлифов, их полировки и травления, на растровом электронном микроскопе Zeiss LEO EVO 50 и оптическом микроскопе Altami Met 1С.

Образцы, полученные при недостаточном прогреве материала медного филамента, показали наличие при таком процессе не проплавленных частей проволоки в структуре, по контуру которой выявлено образование интерметаллидных фаз различного состава. При этом, прогрева подложки и сообщаемого тепла было достаточно для того, чтобы медная проволока проникала на достаточно большую глубину в титановый сплав, обладающий при этом большей температурой плавления.

При перегреве материала подложки происходило нарушение макрогеометрии образца в целом с образованием на поверхности перемешанного материала с преимущественно интерметаллидной структурой и наличием большого количества трещин и отслоений. При этом образование трещин происходило как по границе интерметаллидных фаз, так и внутри достаточно крупных зерен интерметаллидов.

Таким образом, формирование дефектов в режимах, отличающихся от режима оптимального тепловложения при печати композиционных материалов системы Cu-Ti, происходит зависимо от степени недогрева или перегрева в зоне печати, что и определяет тип формируемого дефекта и их объемную долю в материале.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)

DOI: 10.17223/9785946218412/378

**ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ ПРИ АДДИТИВНОМ
ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОМ ПРОИЗВОДСТВЕ ПОЛИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ**

Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Аддитивное изготовление металлических материалов является широко развиваемой отраслью научно-технических работ за последние годы. В литературе большое количество работ посвящено исследованиям материалов, полученных при печати с использованием электродугового, лазерного или электронно-пучкового способов с внедрением в зону печати проволочного или порошкового филаментов. При печати различных материалов неизбежно возникают дефекты, обусловленные выбранным способом расплавления материала, временем существования ванны расплава, используемым филаментом и др. При формировании материалов электронно-лучевым методом с проволочным филаментом в вакууме образование ряда дефектов при отклонении от оптимальных значений параметров печати является практически неизбежным, другие же дефекты в виду отсутствия атмосферного кислорода, образоваться не могут. Существенное значение при 3D-печати в условиях данного метода имеет то, какими материалами осуществляется печать - мономатериалами (то есть металлами или сплавами на основе одного металла) или полиметаллами (сплавами на основе разнородных металлов). При печати последних особую роль играют свойства материалов и типичные диаграммы состояния, обуславливающие формирование механических смесей, интерметаллидных фаз или твердых растворов в структуре образцов. В работе для определения влияния на процесс формирования дефектов в парах металлов, склонных к формированию интерметаллидных фаз, исследованы различные особенности образования дефектов при печати полиметаллических образцов системы Cu-Al, Ti-Al, Fe-Ti и Cu-Ti.

Образцы получены на экспериментальном оборудовании для аддитивного электронно-лучевого производства металлических материалов в Институте физики прочности и материаловедения. Печать образцов осуществлялась в вакууме на охлаждаемом столе проволочным филаментом диаметром 1-1,2 мм. После проведения изготовления образцов из них производилась вырезка металлографических шлифов для исследований внутренней структуры методом растровой электронной и оптической микроскопии, и вырезка образцов для исследования механических свойств граничной зоны вдоль и поперек направления плоскости контакта разнородных материалов.

Проведенные исследования показывают, что во всех случаях аддитивного изготовления металлических композитов систем Cu-Al, Ti-Al, Fe-Ti и Cu-Ti в граничной зоне обнаружено образование интерметаллидных прослоек или сплошного типа или частиц интерметаллидных фаз. Для образцов системы Cu-Ti и Cu-Al характерно наличие в структуре при недогреве медного филамента не проплавленных частиц меди. Для соединений алюминия с титаном или титана со сталью характерны наименьшие механические свойства и отслоения компонентов системы друг от друга по границе сплавления при перегреве материала в условиях печати. Нанесение меди на поверхность титанового сплава приводит к существенному проплавлению подложки при перегреве системы, более ярко выражена такая особенность при нанесении меди на алюминиевый сплав, что ожидаемо в виду его меньшей температуры плавления. Соединения меди и титана при нормальном соотношении параметров процесса печати отличаются наибольшими механическими свойствами и наименьшей дефектностью по сравнению с остальными системами. Таким образом, проведенные исследования показывают, что в полиметаллических образцах различных систем происходит образование дефектов отличных типов и в различной степени влияющих на структуру и механические свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013)

DOI: 10.17223/9785946218412/379

СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ ПОКРЫТИЙ ИЗ МЕДНО-ЦИНКОВОГО СПЛАВА, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА МЕТОДОМ ФРИКЦИОННОЙ ПЕРЕМЕШИВАЮЩЕЙ ОБРАБОТКИ

Чумаевский А.В., Гусарова А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А., Иванов А.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Изготовление покрытий на алюминиевых сплавах с целью повышения прочности и износостойкости поверхностного слоя является одной из актуальных задач в различных отраслях машиностроения. Нанесение покрытий такого рода возможно различными методами, к которым относятся методики аддитивной наплавки, различные методы обработки и осаждения на поверхности покрытий из жидкой или газовой фазы. Одним из методов создания на поверхности покрытий со структурой с наличием градиента от внутреннего объема к поверхностному обработанному слою является фрикционная перемешивающая обработка. В основе фрикционной перемешивающей обработки лежит процесс внедрения в материал исходного пакета листов инструмента, вращающегося с определенной экспериментальным для данных материалов скоростью под действием осевой нагрузки и с последующим перемещением вдоль линии обработки. Полученный в зоне перемешивания материал является механической смесью материалов покрытия и подложки и продуктов реакции материалов в виде частиц интерметаллидных фаз, прослоек интерметаллидов и твердых растворов. Одними из наиболее интересных сплавов для создания покрытий на поверхности алюминиевых сплавов износостойких и упрочненных слоёв являются медь и медные сплавы, обладающие достаточно высокими качествами деталей для трибосопряжений и высокими для ряда сплавов антикоррозионными свойствами. Но для большого спектра сплавов на медной основе, наносимых на поверхность алюминиевых сплавов, в литературе отсутствуют данные по структурно-фазовому приспособлению при фрикционной перемешивающей обработке. Целью настоящей работы является выявление закономерностей формирования структурно-фазового состояния в покрытиях из медно-цинкового сплава Л63 на поверхности алюминиевого сплава АМг5 в условиях фрикционного перемешивания.

В работе использован листовой прокат алюминиевого сплава АМг5 толщиной 5 мм и латуни Л63 толщиной 2 мм в состоянии поставки. Фрикционную перемешивающую обработку проводили инструментом с длиной пина от 2,5 до 3 мм. Из полученных образцов вырезались электроискровым методом металлографические шлифы для анализа внутренней структуры и лабораторные образцы для определения адгезии покрытия к подложке методом отрыва, и образцы для испытаний на одноосное растяжение вдоль линии обработки для определения механических свойств материала покрытий и склонности покрытий к отслоению, и растрескиванию при растяжении.

Проведенные исследования микроструктуры образцов, полученных из сплава Л63 и АМг5 методом фрикционной перемешивающей обработки, показывают, что структура в зоне перемешивания имеет сложный и неоднородный характер, связанный с механизмом формирования материала, основанном на фрикционном перемешивании материала покрытия и подложки совместно с перемещением вдоль линии обработки.

Структура металла в зоне обработки представлена слоями алюминиевого сплава, чередующимися со слоями медного сплава, и результатов взаимодействия указанных компонентов (рисунок 1). Между слоями алюминиевого сплава и медного сплава располагаются (по результатам микрорентгеноспектрального анализа) слои интерметаллидных фаз на основе меди и алюминия, твердые растворы алюминия в меди и др. При этом размер слоёв данных структурных составляющих достаточно неоднороден в различных направлениях.

Механические свойства образцов находятся на уровне свойств алюминиевого сплава. При этом в испытаниях на растяжение вдоль линии обработки за счет различных пластических свойств материалов происходит расслоение покрытия и подложки на этапе разрушения

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

образцов. Испытания на отрыв показывают достаточно высокий уровень адгезии покрытия к подложке, но в ряде испытаний в образцах выявлено резкое падение сцепления покрытия с подложкой за счет формирования по границе сплошной интерметаллидной прослойки.

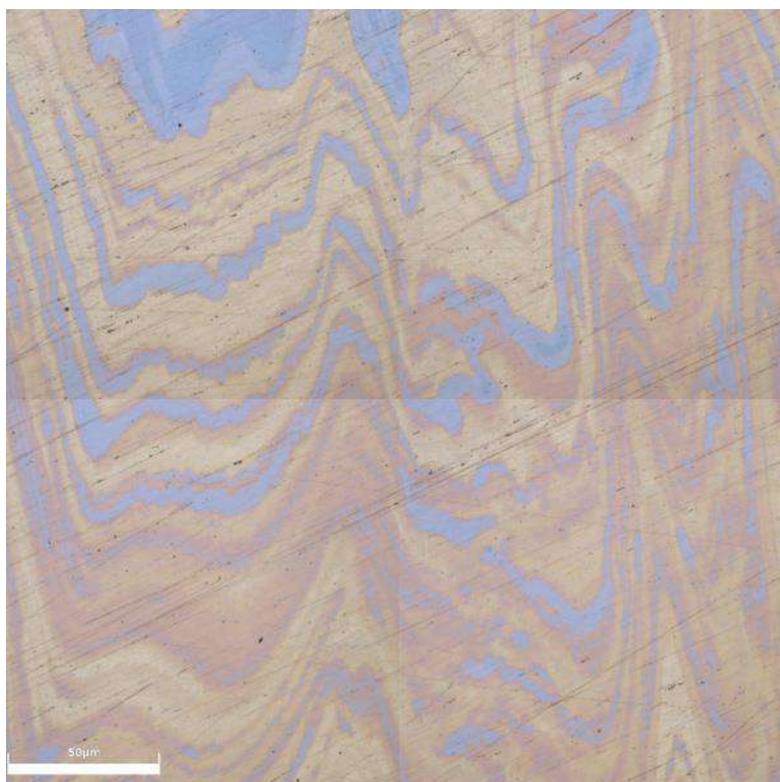


Рисунок 1. Структура образца системы АМг5-Л63 в зоне перемешивания

Проведенные исследования показывают, что в зоне перемешивания при формировании покрытий из разнородных сплавов методом фрикционной перемешивающей обработки происходит образование сложно организованной многофазной слоистой структуры с достаточно высокими механическими свойствами и адгезией к подложке.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление Ш.23, и при поддержке РФФИ (проект № 18-38-00645 мол_а).

DOI: 10.17223/9785946218412/380

**ФОРМИРОВАНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ
ГИБРИДНЫМ АДДИТИВНО-ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИМ МЕТОДОМ**

Чумаевский А.В., Калашников К.Н., Калашникова Т.А., Гусарова А.В.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Изготовление металлических материалов аддитивными методами на настоящее время является одним из наиболее перспективных направлений в развитии современного материаловедения. С помощью технологий 3D-печати возможно изготовление практически неограниченного спектра деталей по формам и размерам, из различных металлов и сплавов и их комбинаций. Существующие методы аддитивного производства обладают различными преимуществами и недостатками, к которым относятся формируемые при различном соотношении параметров процесса и применяемых типов филамента дефекты, производительность метода в зависимости от источника нагрева и применяемого филамента, возможность изготовления полиметаллических или функционально-градиентных материалов, минимальный размер наносимого структурного элемента и др. По типу источника тепла для расплавления металла в зоне печати методики аддитивного производства разделяются на электронно-лучевую, лазерную и электродуговую, по типу филамента - на порошковую или проволочную. При этом возможны и комбинированные варианты. Существующие технологии аддитивного производства деталей в широком спектре применяемых методов и способов печати обладают недостатком - наличием в структуре ориентированных в определенном направлении крупных дендритов, обуславливающих сравнительно низкую прочность материалов, например, алюминиевых сплавов, по сравнению с листовым прокатом, находящимся на уровне литого материала. Применением различных способов постобработки возможно с изменением структуры поверхностного слоя произвести упрочнение его по сравнению с литым материалом. Этого можно добиться, например, применением фрикционной перемешивающей обработки, создающей микрокристаллическую равноосную рекристаллизованную структуру в зоне перемешивания с достаточно высокими показателями прочности и пластичности. При этом данным методом совместно с методом аддитивного производства возможно послойное изготовление материалов с чередующимися в структуре слоями с крупнокристаллической дендритной структурой и мелкокристаллической зеренной упрочненной структурой. В настоящей работе прослежено изменение структуры в образцах алюминиевых сплавов после изготовления гибридным аддитивно-термомеханическим методом, составляющими которого являются аддитивное электронно-лучевое изготовление и фрикционная перемешивающая обработка.

Работа выполнена на экспериментальном оборудовании для аддитивного электронно-лучевого производства и лабораторной установке для сварки трением с перемешиванием в Институте физики прочности и материаловедения. В качестве материала для проведения работ выбран алюминиевый сплав АМг5. Аддитивный процесс выполнялся путем сплавления с подложкой проволоки толщиной 1,2 мм. Обработка трением с перемешиванием производилась инструментами различного размера - от 1,5 до 10 мм. Количество этапов выполнения работы варьировалось от 2 до 5. После процесса печати из образцов электроискровым методом производилась вырезка металлографических шлифов для исследований методами оптической и растровой электронной микроскопии. Также из образцов вырезались лопатки для проведения механических испытаний на растяжение в различных направлениях.

Проведенные исследования показывают, что в процессе аддитивного производства формируется достаточно крупнокристаллическая структура с низкими механическими свойствами сплава АМг5. После обработки механические свойства в направлении движения инструмента возрастают вплоть до значений, характерных для листового проката сплава АМг5. Материал в зоне обработки претерпевает существенные изменения, состоящие из измельчения зерен, рекристаллизации, измельчения и перераспределения вторичных фаз и

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

т.д., дальнейшее нанесение материала на образец аддитивным методом приводит к проплавлению структуры обработанного материала и росту зерен в достаточно широкой зоне, что тем не менее не препятствовало получить в работе материал со слоистой структурой, но с использованием более глубокой обработки материала инструментом с пином длиной 5 мм и более. Таким образом, проведенные работы показывают, что формирование материалов гибридным аддитивно-термомеханическим методом является достижимым и возможным способом получения материалов с гибридной слоистой структурой.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23, и при поддержке Российского научного фонда (проект РНФ № 19-79-00136).

DOI: 10.17223/9785946218412/381

**ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ВОЛОЧЕНИЯ ПРИ
ПОЛУЧЕНИИ ФИЛАМЕНТОВ ИЗ ТИТАНОВОГО СПЛАВА ВТ6**

Попелюх А.И., Тюрин А.Г., Руктуев А.А, Смирнов А.И., Рашковец М.В.
Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Проведена оптимизация технологических параметров волочения при получении филаментов из титанового сплава ВТ6. На основании оценки триботехнических свойств проведен выбор смазочного материала для изготовления металлических филаментов из сплава ВТ6 (проволока, пруток).

В настоящее время одним из перспективных способов получения изделий без использования формообразующей оснастки, позволяющий сократить стадии технологической подготовки производства, является метод «прямого выращивания» или аддитивная технология. Сущность большинства применяемых технологий «прямого выращивания» заключается в послойной наплавке сырья, как правило, в виде порошка. Одной из перспективных форм заготовок, применяемых в аддитивном производстве, является цилиндрический филамент (длинномерная заготовка или пруток круглого сечения) [1]. Использование сырья в виде прутка или проволоки позволяет значительно сократить время его получения, предотвратить появление пор и уменьшить концентрацию кислорода в выращиваемых изделиях. Одним из перспективных типов материалов для аддитивных технологий являются титановые сплавы, в этом случае в качестве основной формообразующей технологии для получения филаментов является технология волочения. В связи с этим актуальную задачу представляет собой оптимизация технологии волочения филаментов из титанового сплава для аддитивного производства.

Для выявления оптимальных технологических режимов волочения титановой проволоки была проведена оценка влияния типа смазочного материала на коэффициент трения. Выбор типа смазочных материалов осуществлялся в соответствии с рекомендациями [2, 3]. Анализ полученных значений показывает, что предпочтительным видом смазочного материала для использования в паре трения «титановый сплав – твердый сплав» является смазка на основе пчелиного воска. В этом случае коэффициент трения составляет 0.06, что примерно соответствует коэффициенту трения антифрикционных материалов. Волочение реализовывали на электромеханической системе типа Instron 3369 путем протягивания цилиндрической заготовки из сплава ВТ6 (исходный диаметр 4 мм) через твердосплавные фильеры диаметрами 3,8; 3,4; 3,2; 2,8; 2,5; 2,3; 2,0; 1,8; 1,5; 1,3 и 1,2 мм, при скоростях протягивания заготовки через волоку 30, 60, 120, 240, 360 мм/мин. В процессе волочения фиксировалось усилие волочения.

Волочение сплава ВТ6 (исходный диаметр 4 мм) на диаметр 3.8 мм со скоростями 30, 60, 120, 240, 360 мм/мин свидетельствует о практически одинаковых значениях усилия при волочении. Сила, возникающая при протягивании заготовки с указанными скоростями примерно одинакова и составляет 2675 Н, что соответствует напряжению волочения 235 МПа. Следует отметить, что силовые показатели волочения практически не зависят от скорости волочения, а в значительной степени определяются типом смазывающего материала и разницей между диаметрами заготовки и волокна. Так, например, волочение проволоки диаметром 4.0 мм из сплава ВТ6 на диаметр 3.8 мм без смазывающего материала приводит к увеличению усилия волочения с 2691 Н со смазкой воском до 3269 Н при сухом трении и напряжения волочения с 237 МПа до 289 МПа.

В случае реализации волочения на лабораторном оборудовании целесообразно использовать скорость 240 мм/мин поскольку скорость 360 мм/мин является предельно-допустимой, а при скоростях менее 240 мм/мин производительность получения филаментов будет слишком низкой. Волочение сплава ВТ6 (исходный диаметр 4 мм) на диаметр 3,8 мм со скоростями 30, 60, 120, 240, 360 мм/мин свидетельствует о практически одинаковых значениях усилия при волочении. Сила, возникающая при протягивании заготовки с указанными

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

скоростями примерно одинакова и составляет 2675 Н, что соответствует напряжению волочения 235 МПа.

При реализации волочения титанового сплава ВТ6 (отжиг 650 °С) по маршруту $\varnothing 4$ мм исходн. $\rightarrow \varnothing 3,8$ мм $\rightarrow \varnothing 3,4$ мм $\rightarrow \varnothing 3,2$ мм $\rightarrow \varnothing 2,8$ мм происходит увеличение силовых показателей волочения и снижение коэффициента запаса прочности протягиваемой заготовки.

Следует отметить высокое значение коэффициента запаса прочности при волочении через волоку диаметром 3,8 мм, что свидетельствует о нерационально выбранной степени пластической деформации. В данном случае более эффективным представляется волочение исходной заготовки $\varnothing 4$ мм через волоку меньшего диаметра, например 3.7 или 3.6 мм. Деформирование же заготовки с $\varnothing 3.2$ на $\varnothing 2.8$ наоборот отличается низким значением коэффициента запаса прочности. Низкие значения коэффициента запаса прочности приводят к частым обрывам проволоки, что существенно снижает производительность обработки сплава давлением. Одним из способов решения указанной проблемы является применение смягчающей термической обработки перед волочением на $\varnothing 2,8$ с целью снижения предела текучести σ_t , что приведет к повышению коэффициента запаса прочности до диапазона 1,2 – 2,3. Проведение отжига проволоки из сплава ВТ6, полученной после волочения через волоку $\varnothing 3,2$, при температуре 650 °С в течение 1 часа в вакуумной печи способствует снижению прочностных характеристик и повышению характеристик пластичности.

По аналогичной последовательности были определены напряженно-силовые показатели волочения через волоки $\varnothing 3,2 \rightarrow \varnothing 2,8 \rightarrow \varnothing 2,5 \rightarrow \varnothing 2,3 \rightarrow \varnothing 2,0$ и $\varnothing 2,0 \rightarrow \varnothing 1,8 \rightarrow \varnothing 1,5 \rightarrow \varnothing 1,3 \rightarrow \varnothing 1,2$.

По результатам проведенных экспериментальных исследований можно сделать вывод, что при получении экспериментальных образцов цилиндрических филаментов из титанового сплава ВТ6 малых сечений, диаметром до 1.2 мм, волочение необходимо осуществлять в несколько пропусков с промежуточными разупрочняющими отжигами. На основе анализа полученных зависимостей усилия волочения, напряжения волочения и коэффициента запаса прочности, а также механических свойств получаемых изделий был составлен маршрут волочения цилиндрических филаментов из сплава ВТ6 (отжиг 650 °С) $\varnothing 4$ мм исходн. $\rightarrow \varnothing 3,8$ мм $\rightarrow \varnothing 3,4$ мм $\rightarrow \varnothing 3,2$ мм \rightarrow Отжиг 650 °С $\rightarrow \varnothing 2,8$ $\rightarrow \varnothing 2,5$ $\rightarrow \varnothing 2,3$ $\rightarrow \varnothing 2,0$ \rightarrow Отжиг 650 °С $\rightarrow \varnothing 1,8$ $\rightarrow \varnothing 1,5$ $\rightarrow \varnothing 1,3$ $\rightarrow \varnothing 1,2$.

1. Brandl E. et al. Additive manufactured Ti-6Al-4V using welding wire: comparison of laser and arc beam deposition and evaluation with respect to aerospace material specifications //Phys. Procedia. – 2010. – Т. 5. – №. Pt 2. – С. 595-606. Chester Thomas Sims, N. S. Stoloff, William C. Hagel. The Superalloys // Wiley, 1987. – 615 с.
2. Справочник волочильщика проволоки / Горловский М.Б., Меркачев В.Н. – М. : Металлургия, 1993 . – 335 с. Горловский М.Б., Меркачев В.Н. Справочник волочильщика проволоки. М.: Металлургия, 1993. 335 с.
3. Перлин И.Л., Ерманок М.З. Теория волочения. М.: Металлургия, 1971. 448с.

DOI: 10.17223/9785946218412/382

**СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ ОБЛАСТИ В РЕЗУЛЬТАТЕ
ВОЗДЕЙСТВИЙ НСЭП ВБЛИЗИ ПОРОГА ПЛАВЛЕНИЯ TiNi**

¹Нейман А.А., ¹Семин В.О., ^{1,2}Мейснер Л.Л., ^{1,2}Гудимова Е.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

²*НИ Томский государственный университет, Томск, Россия*

nasa@ispms.ru

Повышение коррозионной стойкости медицинских материалов, к которым относятся сплавы на основе никелида титана, является актуальной задачей инженерии поверхности. Как показали многочисленные исследования, воздействие низкоэнергетическими сильноточными электронными пучками (НСЭП) вызывает сверхбыстрые термические процессы, улучшающие физико-химические и прочностные свойства обрабатываемого материала. Использование такого метода обработки материала приводит к изменению химического состава, структурного и напряженно-деформированного состояний поверхностной области, что может снизить величину проявления эффектов сверхэластичности и памяти формы конечного изделия из TiNi. Использование НСЭП обработки с плотностью энергии, соответствующей порогу плавления обрабатываемого материала, позволит минимизировать влияние поверхностного модифицированного слоя на функциональные свойства.

Ранее проведенные численные расчеты позволили определить значение плотности энергии НСЭП, при которой начинается плавление TiNi сплава, равное $E_s = 2$ Дж/см². При исследованиях сплава TiNi после НСЭП обработки с плотностями энергии электронного пучка в диапазоне $E_s = 1-2$ Дж/см² действительно наблюдалось плавление тонкого поверхностного слоя материала, структура которого детально не была изучена.

Цель работы – исследовать структуру поверхностного слоя, которая формируется в результате импульсного воздействия электронным пучком с плотностью энергии вблизи теоретически рассчитанного порога плавления TiNi.

Образцы для исследования вырезали из прокатного листа сплава TiNi готовили химическим травлением, механической шлифовкой и электролитической полировкой. НСЭП обработку провели на автоматизированной установке РИТМ-СП (ИСЭ СО РАН, Томск, Россия) при параметрах электронного пучка: $E_s = 1,1$ Дж/см², длительность импульса – 2-3 мкс, энергия электронов – 19 кэВ, количество импульсов 5 и 15, выдержка между импульсами составила 10 с.

Структурное состояние модифицированного поверхностного слоя TiNi было проанализировано методами XRD и TEM / EDS / SAED в поперечной геометрии. Установлено, что для работы в режиме поверхностного плавления TiNi достаточно использование указанного режима НСЭП обработки. Уже при пятикратном импульсном воздействии область поверхности очищается от частиц второй фазы, и столбчатая структура, типичная для этого типа модификации поверхности, формируется на глубину 1 мкм. Увеличение воздействия ЛЕНСПЕВ до 15 импульсов приводит к двукратному увеличению как толщины модифицированного слоя, так и размера его структурных элементов.

Показано, что использованная в работе плотность энергии пучка $E_s = 1,1$ Дж/см² (вдвое меньше расчетной) является достаточной для обработки TiNi в режиме поверхностного плавления. Уже при пятикратном импульсном воздействии наблюдается очистка приповерхностной области от частиц вторых фаз и формирование столбчатой структуры, характерной для данного вида поверхностной модификации. Увеличение количества импульсов НСЭП воздействия приводит к увеличению как толщины модифицированного слоя, так и размеров его структурных элементов.

DOI: 10.17223/9785946218412/383

**ОБЕСПЕЧЕНИЕ ТОЧНОСТИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ФИЛАМЕНТОВ ДЛЯ
АДДИТИВНОГО ПРОИЗВОДСТВА ИЗДЕЛИЙ МЕТОДОМ
ЭЛЕКТРОННОЛУЧЕВОГО ОПЛАВЛЕНИЯ**

Янпольский В.В., Тюрин А.Г., Руктуев А.А.

Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Аддитивное производство представляет собой принципиально новый процесс изготовления деталей по трёхмерной модели путем послойного наращивания и добавления материала. Наряду с высокопроизводительным автоматизированным производством и роботизацией производственных систем эти технологии, являются наиболее динамично развивающимся направлением цифрового производства. Аддитивные технологии в отличие, например, от литья, благодаря точным параметрам исходной 3D-модели позволяют получать высокую точность поверхностей изделий, производя детали, которые затруднительно либо невозможно получить стандартными методами обработки материалов. Кроме того, новые технологии могут существенно сократить длительность производственного цикла, сроков и стоимости запуска изделий в производство благодаря отсутствию необходимости в специализированной инструментальной оснастке [1, 2].

Работа большинства из представленных на рынке 3D принтеров основана на лазерном послойном спекании порошковых металлических материалов. Несмотря на широкое распространение этих принтеров в мире, они обладают недостатками, один из них связан с остаточной пористостью [1-3]. Этому недостатка лишены электроннолучевые принтеры. Однако эта технология оплавления металлических материалов только начинает применяться при проектировании оборудования для аддитивного производства изделий. Одной из важных задач создания оборудования и технологии аддитивного производства изделий методом электроннолучевого оплавления металлического материала является разработка технологии получения филаментов определённого химического состава и требуемой точности.

В качестве способа получения цилиндрических филаментов для аддитивного производства изделий методом электроннолучевого оплавления был выбран процесс волочения заготовок через монолитную волоку. Процесс волочения экспериментальных заготовок осуществлялся на универсальной электромеханической системе типа Instron 3369. Для волочения использовали волокни-заготовки формы 8 из твердого сплава ВК3. Маршрут волочения состоял из следующих переходов: 3,8 мм - 3,4 мм - 3,2 мм - 2,8 мм - 2,5 мм - 2,3 мм - 2 мм - 1,8 мм - 1,5 мм – 1,3 мм. В качестве модельного материала для разработки технологии изготовления филаментов была выбрана проволока из аустенитной хромоникелевой стали 12X18H9T диаметром 4 мм. Для повышения пластичности проволоки перед волочением проводили термическую обработку, заключающуюся в нагреве до температуры 1050 °С, выдержке при этой температуре 15 мин. и последующее охлаждение в воде. Скорость волочения составляла 240 мм/мин. Усилие волочения составляло около 1500 Н, что обеспечивало получение филаментов без задигов и обрывов.

На основании предварительных экспериментов по изготовлению деталей методом электроннолучевого оплавления было установлено, что предельные отклонения диаметров филаментов не должны превышать значения -0,090 мм для филаментов номинальным диаметром 1,00 – 1,5 мм.

Для определения предельных размеров филамента на каждом переходе волочения заготовки из стали 12X18H9T была составлена схема графического расположения припусков и допусков, представленная на рисунке 1. В результате проведенного расчета было установлено, что предельные размеры заготовки для получения филаментов диаметром $\varnothing 1,3 \pm 0,09$ мм составляют $\varnothing 4,27_{-0,17}$ мм.

Вместе с тем в результате измерения диаметров филаментов после каждого перехода волочения было установлено, что диаметр заготовки из стали 12X18H9T незначительно превышает значение диаметра фильеры (таблица 1).

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

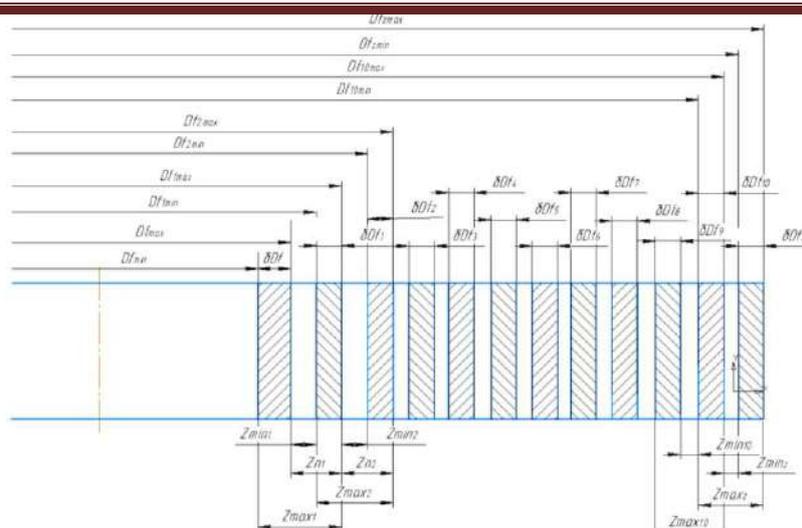


Рисунок 1. Схема графического расположения припусков и допусков на волочение филамента диаметром $\varnothing 1,3_{-0,09}$ мм.

Df_{min} и Df_{max} – минимальный и максимальный предельные размеры филамента $\varnothing 1,3_{-0,09}$ мм;
 $Z_{min1} \dots Z_{min10}$, $Z_{max1} \dots Z_{max10}$ – предельные значения припусков на переходах волочения с диаметрами фильер: 1,5 мм, 1,8 мм, 1,8 мм, 2 мм, 2,3 мм, 2,5 мм, 2,8 мм, 3,2 мм, 3,4 мм, 3,8 мм;
 Z_{minz} , Z_{maxz} – предельные значения припусков заготовки из стали 12X18H9T при получении филаментов диаметром $\varnothing 1,3_{-0,09}$ мм;

δDf , $\delta Df_1 \dots \delta Df_{10}$, δDf_z – допуски на диаметр филамента, промежуточных размеров на переходах волочения с диаметрами фильер: 1,5 мм, 1,8 мм, 1,8 мм, 2 мм, 2,3 мм, 2,5 мм, 2,8 мм, 3,2 мм, 3,4 мм, 3,8 мм и заготовки из стали 12X18H9T при получении филаментов диаметром $\varnothing 1,3_{-0,09}$ мм.

Таблица 1 – Результаты измерения размеров заготовки из стали 12X18H9T на каждом переходе волочения

Диаметр волокна, мм	3,8	3,4	3,2	2,8	2,5	2,3	2	1,8	1,5	1,3
Действительные размеры заготовки из стали 12X18H9T, мм	3,84	3,45	3,24	2,86	2,56	2,37	2,06	1,87	1,56	1,37

Таким образом, в результате проведенных экспериментальных исследований было установлено, что предельные размеры заготовки для получения филаментов диаметром $\varnothing 1,3_{-0,09}$ мм составляют $\varnothing 4,27_{-0,17}$ мм. Установленное отклонение размеров полученных филаментов, вероятно, связаны с тем, что в процессе волочения возникают упругие пластические деформации. В соответствии с этим при выполнении операции волочения заготовок из стали 12X18H9T при получении филаментов диаметром $\varnothing 1,3_{-0,09}$ мм необходимо диаметр волокна вышлифовать с учетом величины возникающих упругих деформаций, т.е. на 0,05 мм меньше.

1. Аддитивные технологии в машиностроении: пособие для инженеров / М.А. Зленко, М.В. Нагайцев, В.М. Довбыш. – М. ГНЦ РФ ФГУП «НАМИ» 2015. – 220 с.
2. Сапрыкин, А.А. Изготовление металлических изделий методами послойного синтеза /А.А. Сапрыкин, Н.А. Сапрыкина // XI Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии». – Томск: Изд-во Томского политехн. Ун-та, 2005. –Т.1. – С. 216-218.
3. Savchenko N.L., Vorontsov A.V., Utyaganova V.R., Eliseev A.A., Rubtsov V.E., Kolubaev E.A. Features of the structural-phase state of the alloy Ti-6Al-4V in the formation of products using wire-feed electron beam additive manufacturing. Obrabotka metallov (tehnologiya, oborudovanie, instrumenty) = Metal Working and Material Science, 2018, vol. 20, no. 4, pp. 60–71. doi: 10.17212/1994-6309- 2018-20.4-60-71.

DOI: 10.17223/9785946218412/384

**DEVELOPMENT OF ELECTRON-BEAM EQUIPMENT AND TECHNOLOGY OF
LAYER WELDING OF THE WIRE IN THE CONDITIONS OF ADDITIVE
TECHNOLOGIES**

Fedorov V.V., Klimenov V.A., Batranin A.V., Pardeep Ranga
National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation

Currently, more and more often, a wide range of additive technologies (or 3D printing technologies) are used to solve problems of obtaining metal products of complex shape with anisotropic properties. If it is necessary to print thick-walled parts with less accuracy (a few millimeters) and greater productivity, the method of dimensional electron beam surfacing with wire is promising. At its core is a vacuum chamber with an electron-beam gun with a plasma emitter and modular manipulators, providing the possibility of layer-by-layer alloying of powders (EBM) or dimensional deposition with wire. The software provides the possibility of modular replacement and synchronized control of all installation organs, according to the task, using digital G - codes. Printing was carried out at an accelerating voltage of 30 kV and a beam current of 15 to 20 mA (depending on the distance from the substrate), thus, the input power varied from 450 to 600 watts. The focused beam (diameter 150 μm) moved in a circular scan 4 mm in diameter. During the work, samples from wires of titanium alloy Ti-6Al-4V and steel AISI 304 were printed on an electron-beam 3D-printer. The study of the quality of the formed samples on the subject of porosity and structural heterogeneity, and hence the mechanical properties was carried out in the work of non-destructive testing methods using computed tomography and methods of mechanical testing and metallography. It is shown that the regulation of the modes of radiation exposure and modes of wire feeding and beam scanning allows obtaining titanium and steel products with high microstructural uniformity and satisfactory mechanical properties, but the problem of reducing macro porosity requires new approaches to optimize microstructural uniformity and porosity.

DOI: 10.17223/9785946218412/385

**SURFACE MODIFICATION OF SELECTIVE LASER MELTED Ti-6Al-4V PARTS BY
ULTRASONIC IMPACT TREATMENT AND ELECTRON BEAM IRRADIATION**

¹Sinyakova E.A., ^{1,2} Panin S.V., ³ Teresov A.D.

¹*Institute of Strength Physics and Materials Science of the SB RAS, Tomsk, 634055, Russia*

²*National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, 634050, Russia*

³*Institute of High Current Electronics, Tomsk, 634055, Russia*

mea@ispms.tsc.ru

Abstract. Changes of the surface roughness, microstructure, phase composition and microhardness of selective laser melting Ti-6Al-4V samples during electron beam irradiation and ultrasonic impact treatment were investigated by contact profilometry, optical microscopy, X-ray analysis, and hardness measurement. It was shown that electron beam irradiation and ultrasonic impact treatment of the selective laser melted Ti-6Al-4V samples smooth their surface. Significant refinement of the microstructure and TiO nanoparticles formation under ultrasonic impact treatment occur causing the increased surface microhardness. Electron beam irradiation intern leads to a more significant increase in both the microhardness and thickness of the melted surface layer due to martensitic transformation.

Introduction

In recent years, additive manufacturing of Ti-6Al-4V parts has made significant progress, especially with respect to process optimization and property characterization. Selective laser melting (SLM) is one of the promising technologies that have been attracting increasing attention in aerospace and biomedical fields due to their advantages of producing prototypes or finalized parts rapidly and cost-effectively, whilst providing accurate control over both internal architectures and complex-shapes [1,2]. In SLM, consolidation of metal powder is achieved by melting and solidifying a small volume of material in a track-by-track and layer-by-layer fashion using a high-intensity laser. On repeating the single track deposit with a well-defined overlap (hatch spacing), a layer of a cross-section is produced. Upon repeating this layer-by-layer deposition, an entire part is constructed [3]. However, due to insufficient energy on the melt pool, edge only partial melted powder particles occur. Additionally, the top and side surfaces are characterized by the stair step effect as a result of the layer wise character of the SLM process. Surface roughness is critical for many applications, so parts fabricated by the SLM method require machining before being put in use.

Nowadays, increasing interest is given to mechanical grinding and polishing [4], ball burnishing [5], shot peening [6], ultrasonic impact treatment [7], and other mechanical post-processing technologies that allow not only smoothening of the rough surface finish of as-fabricated parts, but also an increase of their hardness, strength, wear resistance, and fatigue life. Besides, the pulsed electron beam irradiation can be effectively used as thermal post-processing techniques of 3D-printed titanium components [8]. In the present work, ultrasonic impact treatment based on plastic deformation of the surface and electron beam irradiation causing the melting of the surface layer and its rapid crystallization are considered as post-processing methods.

Experimental details

The powder of Ti-6Al-4V alloy manufactured by AP & C, a Canada-based company, was used as an initial material for 3D printing of samples. Average particle size is ~ 30 μm. SLM samples were produced on the EOSINT M280 machine (EOS Electro Optical Systems, Munich, Germany), equipped with an CO laser. Cuboid blanks with the dimensions of 10×10 mm and height of 70 mm were vertically fabricated in an argon atmosphere on a 10-mm thick titanium plate. Square samples of 10x10x1 mm designed for structural studies and microhardness measurements were cut out from each of the blanks by electro-discharge machining.

Ultrasonic impact treatment of the SLM Ti-6Al-4V samples was carried out in air with natural air cooling using an IL4 ultrasonic generator. The ultrasonic generator had an output power of 2000 W and a frequency of 25 kHz. The impact load of the striker was 150 N. The speed of the striker along the X and Y-axes was 1.5 and 3 mm/s, respectively.

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

The low energy high current pulsed electron beam irradiation of the SLM Ti-6Al-4V samples was carried out using a SOLO (IHCE SB RAS, Tomsk) electron-beam plant by 6 consecutive pulses 120 μs in length. The beam energy density (fluence) was equal to $W=60 \text{ J/cm}^2$, the energy of electrons was 17 KeV and the pulse frequency was 0.3 s^{-1} . The irradiation was performed in Ar atmosphere at a residual pressure of 0.02 Pa.

The surface morphology of the as-fabricated and post treated SLM samples was studied, using a Leo EVO scanning electron microscope (SEM) and a New View 6200 3D optical profiler. Metallographic studies in the longitudinal and transverse sections of etched 3D-printed samples were performed using Zeiss Axiovert 40 MAT. The microhardness was measured at the lateral surface of Ti-6Al-4V alloy samples using the 50 g load for 10 s. The first measurement of microhardness was made at a distance of 10 μm from the top surface. Each microhardness point was obtained by doing parallel measurements at the same distance on the lateral surface and calculating the average value. The distance between any two neighboring indentations was more than 10 μm .

Results and discussion

Surface profile of the as-fabricated SLM sample revealed an irregular surface composed of peaks and valleys (Fig.1,a, curve 1). As can be seen in Fig.1,b, SLM samples contain partly melted powder particles adhered to the surface. The size of these partially sintered particles ($\sim 30 \mu\text{m}$ average) is comparable to the powder particles used for the fabrication of the part. The roughness analysis reveals that the root mean square roughness (Rq) of the as-fabricated samples, determined by contact profilometry, is 20 μm .

During electron beam irradiation rapid heating, melting, and crystallization in a thin melted layer of the SLM Ti-6Al-4V samples occur causing the surface smoothing and formation of grain structure on it (Fig.1,a, curve 2 and Fig.1,c,d). The lateral size of the surface grains is 250 μm . The root mean square roughness of the electron-beam irradiated samples is $Rq=2.51 \mu\text{m}$.

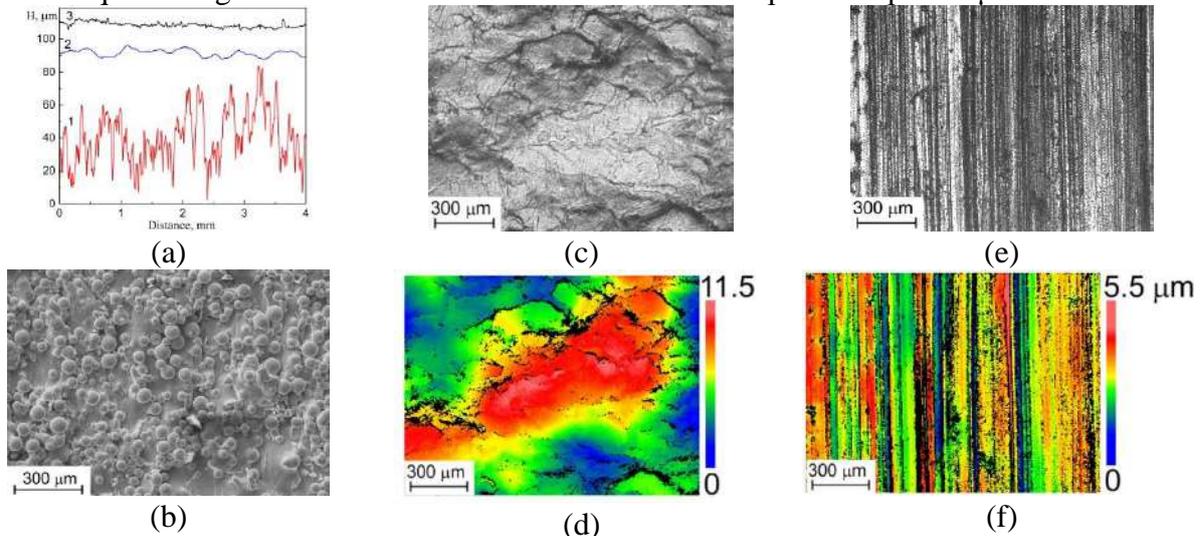


FIG. 1. Surface profiles (a), SEM-mages (b) and optical images of the surface ((c-f) of as-fabricated (b), electron beam irradiated (c,d) and ultrasonically treated SLM sample (t, f). (a):

1-as-fabricated, 2-electron beam irradiated and 3- ultrasonically treated SLM Ti-6Al-4V samples

During ultrasonic impact treatment the impact of a striker oscillating at an ultrasonic frequency caused the formation of periodic hills, 150 μm wide and 3 μm high, along the entire surface of the SLM samples (Fig. 1,a, curve 3 and Fig. 1,e,f). These hills are formed as a result of plastic displacement of the processed material along the edges of the metal striker moving across the surface of the sample. The root mean square roughness of the ultrasonically treated samples decreases to $Rq=0.48 \mu\text{m}$.

X-ray analysis of SLM Ti-6Al-4V samples reveals peaks of hpc α phase with lattice parameters $a = 2.9233$, $c = 4.6633 \text{ \AA}$. There are no peaks of β phase on the diffraction pattern (Fig. 2, curve 1). In addition, the SLM samples are characterized by the presence of high internal tensile macrostresses, reaching 2.9 GPa. The electron beam irradiation of the SLM sample causes a change in the intensity of the α phase peaks, which indicates the occurrence of recrystallization processes in the melted

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

surface layer. Along with a change in the intensity, broadening of the α phase peaks is observed which can be caused both by strong distortion and by α' phase formation in the melted surface layer (Fig.2, curves 1 and 2). Internal tensile macrostresses reduce to 150 MPa under electron beam irradiation. After ultrasonic impact treatment (Fig.2, curve 3) the intensity of the α -phase peaks is considerably lower than in the as-fabricated Ti-6Al-4V sample, and significant broadening of the peaks is also observed. It is indicative of high residual compressive stresses (1.5 GPa) and significant refinement of crystallites. Besides, redistribution of individual α -phase peak intensities appears to take place along with formation of the preferred crystallographic orientation (002). β -phase peaks are also not observed, while peaks corresponding to titanium oxide TiO appear on X-ray patterns of samples subjected to ultrasonic impact treatment (Fig.2, curve 3).

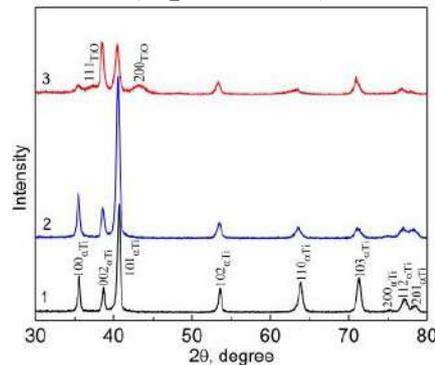


FIGURE 2. X-ray diffraction patterns of as-fabricated (1), electron beam irradiated (2) and ultrasonically treated SLM Ti-6Al-4V samples (3)

The microstructure of the as-fabricated Ti-6Al-4V sample was studied both in orientation parallel to the direction of sample growth (longitudinal-section) and in orientation parallel to the substrate (cross-section). It was established that with layer-by-layer growth of the studied samples high temperature gradients form within the samples, as a result the microstructure of the SLM samples in the longitudinal and transverse sections is markedly different. As can be seen in Fig. 3,a, in the plane parallel to the sample growth direction the macrostructure is represented by columnar prior β phase grains with a high degree of anisotropy. The width of the columnar grains varies from 100 to 200 μm , and their length reaches 600 μm . The microstructure in the cross-section of SLM samples is represented by equiaxial prior β phase grains with an average size of 150 μm (Fig.1,b).

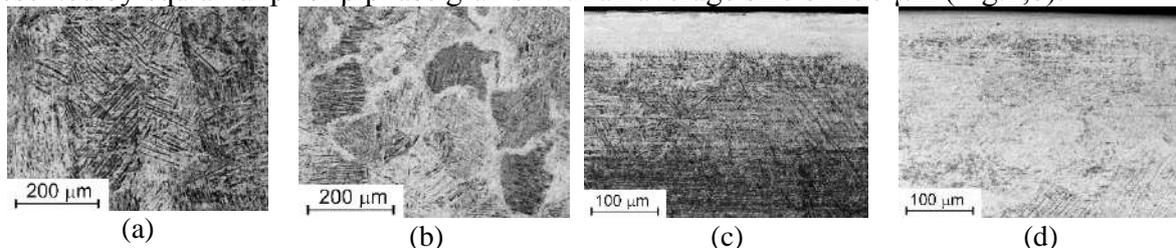


FIG. 3. Cross-section optical images of as-fabricated (a), electron beam irradiated (b) and ultrasonically treated SLM Ti-6Al-4V samples (c) with subsequent etching

Electron beam irradiation and ultrasonic impact treatment were performed along longitudinal sections and metallographic studies were done on transverse sections of the SLM samples. Electron beam irradiation of as-fabricated SLM samples resulted in substantial structure modification of their surface layer caused by its melting followed by rapid crystallization. The cross-section analysis of the samples by optical microscopy showed that the modified surface layer has a multilayer structure (Fig.3,c). The homogenous melted layer having a brighter contrast is formed at the top surface. The heat-affected zone is located below this layer. The thickness of the melted surface layer and the heat-affected zone are 60 and 130 μm , respectively.

Cross-sectional optical images of ultrasonic treated samples reveal significant grain refinement in the thin surface layer which manifest itself in a white (non-etched) continuous layer on the metallographic images (Fig.3,d). The depth of the modified surface layer is 30 μm .

Electron beam irradiation of SLM samples leads to a twofold increase in the microhardness (10 GPa) of their surface layers (Fig.4, curves 1 and 2). Three segments of the microhardness vs. distance

Секция 7. Аддитивные технологии формирования материалов, изделий и конструкций с иерархической структурой

from surface plots can be distinguished: (i) the one with constant high hardness, which well agrees with the thickness of the melted surface layer; (ii) the one with gradient descending hardness that corresponds to the heat affected zone; and (iii) the one with the hardness typical for as-fabricated Ti-6Al-4V alloy (Fig.4, curve 2). Grain refinement and formation of slip bands and twins in surface layer of the SLM samples subjected to ultrasonic impact treatment causes an increase in their surface microhardness to 8.5 GPa (Fig.4, curve 3). The depth of the hardened surface layer does not exceed 30 μm .

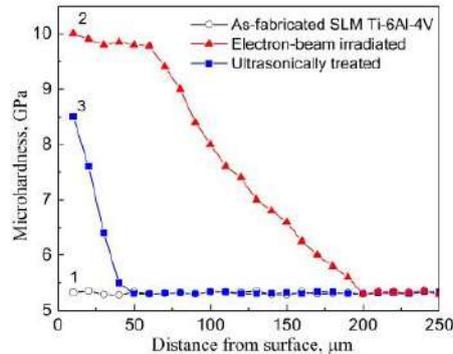


FIG. 4. Microhardness of as-fabricated (1), electron-beam irradiated (2) and ultrasonically treated SLM Ti-6Al-4V samples (3) vs. distance from surface

Summary

It was shown that electron beam irradiation and ultrasonic impact treatment of the SLM Ti-6Al-4V samples lead to a significant reduction of the surface roughness. The roughness analysis reveals that the root mean square roughness of the as-fabricated samples, determined by contact profilometry, is 20 μm . Intensive plastic deformation of SLM Ti-6Al-4V samples under ultrasonic impact treatment leads to significant grain refinement and reduction of the surface roughness to $R_q=0.48 \mu\text{m}$. Under electron beam irradiation as a result of rapid heating, melting, and crystallization grain size is rise to 250 μm . The different growth rates of prior β grains with different crystallographic orientations cause the orange-pill surface effect and root mean square roughness of irradiated sample reduce to $R_q=2.51 \mu\text{m}$.

Moreover, electron beam irradiation and ultrasonic impact treatment are effective hardness enhancement methods. Microstructure refinement and formation of titanium oxide TiO in a surface layer of SLM Ti-6Al-4V samples subjected to ultrasonic impact treatment causes increase in microhardness from 5.3 to 8.5 GPa. The depth of hardened surface layer is 30 μm . The depth of the hardened surface layer formed under electron beam irradiation is more pronounced (200 μm) and the maximum hardness reaches 10 GPa. The latter can be associated with α' phase formation in the melted surface layer as a result of rapid cooling.

Acknowledgments

The work was financially supported by the Russian Federation via the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement no. 05.583.21.0089, project identifier rfmeFi58318x0089).

1. S. Bagherifard, S. Slawik, I. Fernández-Pariente, et al., *Mater. Des.* **102**, 68–77 (2016).
2. W. E. Frazier, *J. Mater. Eng. Perform.* **23**, 1917–1928 (2014).
3. I. Gibson, D. Rosen, B. Stucker, “Design for Additive Manufacturing,” in *Additive Manufacturing Technologies*, edited by Gibson I. (Springer, Boston, MA, 2010), pp. 299–332.
4. P. Edwards, M. Ramulu, *Mater. Sci. Eng., A.* **598**, 327–33726 (2014).
5. M.Salmi,; J.Huuki,; I.F. Ituarte, *Prog. Addit. Manuf.* **2**, 31–41 (2017).
6. B. AlMangour, J.-M. Yang, *Mater. Des.* **110**, 914–924 (2016).
7. V. E. Panin, A. V. Panin, Yu. I. Pochivalov, T. F. Elsukova, A. R. Shugurov, *Phys. Mesomech.* **20**, 55–68 (2017).
8. P.K. Farayibi, T.E. Abioye, J.W. Murray, P.K. Kinnell, A.T. Clare, *J. Mater. Process. Technol.* **218**, 1–11 (2015).

DOI: 10.17223/9785946218412/386

**ВЛИЯНИЕ ИМПУЛЬСНОЙ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКИ НА
МИКРОСТРУКТУРУ КОМПОЗИТА TiC/Ti-6Al-4V, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ
ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ**

Синякова Е.А., Панин А.В., Панин С.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Методами рентгеноструктурного и EBSD анализа, сканирующей и оптической микроскопии исследовано влияние импульсной электронно-пучковой обработки на закономерности изменения микроструктуры и фазового состава композита TiC/Ti-6Al-4V, полученного методом прямого лазерного осаждения.

В работе показано, что микроструктура титанового композита TiC/Ti-6Al-4V, полученного методом прямого лазерного осаждения, представляет собой первичные зерна β фазы титана равноосной формы, внутри которых формируются ламели α -Ti с различной ориентацией. Установлено, что в процессе формирования композита TiC/Ti-6Al-4V в нем происходит частичное расплавление больших частиц карбида, с образованием мелких частиц TiC размером 2 мкм круглой формы, расположенных по границам первичных зерен β фазы. Растворение большие частицы TiC размером 30 мкм в процессе лазерного осаждения не происходит.

Импульсная низкоэнергетическая электронно-пучковая обработка приводит к плавлению и быстрой кристаллизации поверхностного слоя композита TiC/Ti-6Al-4V толщиной 60 мкм. Структура расплавленного слоя представлена столбчатыми зернами первичных зерен β фазы. В результате обработки происходит измельчение ламелей альфа титана и частиц карбида TiC. При этом объемная доля β фазы и карбида титана TiC снижается. Подобное изменение структурно-фазового состояния поверхностного слоя композита TiC/Ti-6Al-4V приводит к двукратному увеличению его твердости.

Работа выполнена в рамках Программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» Министерства науки и высшего образования РФ; Соглашение № 05.583.21.0089, идентификатор проекта RFMEFI58318X0089.

DOI: 10.17223/9785946218412/387

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ ПРИ
СТАТИЧЕСКОМ И ЦИКЛИЧЕСКОМ РАСТЯЖЕНИИ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ
НИКЕЛИДА ТИТАНА ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ НИЗКО- ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ
СИЛЬНОТОЧНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ**

Мейснер С.Н., Власов И.В.

*Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск*

В работе изучено влияние числа импульсов воздействия низкоэнергетическим сильноточным электронным пучком (НСЭП) при постоянной плотности энергии электронов на деформационное поведение сплава на основе никелида титана (TiNi), его характеристики неупругости и разрушения при механических испытаниях в условиях квазистатического осевого растяжения.

Показано, что при использовании одних и тех же параметров низкоэнергетического сильноточного электронного пучка, выборе импульсного режима облучения и оптимального числа импульсов облучения НСЭП можно сохранить параметры неупругости TiNi сплава и повысить одновременно его пластичность и прочность до разрушения. Модификация поверхностного слоя TiNi образцов с помощью импульсных воздействий НСЭП приводит, при одноосном статическом растяжении, к увеличению размера площадки мартенситной текучести $\Delta \epsilon_M$ на 15-30 % больше, чем в необлученном TiNi образце. Обсуждаются причины разного влияния НСЭП обработок (в зависимости от числа импульсов) на прочностные и упруго-пластические характеристики TiNi сплавов: после НСЭП-обработки с $n=15, 32$ главной причиной понижения параметров прочности TiNi сплава является наличие столбчатой структуры матричной B2-фазы с определенной ориентацией $(110 \parallel B2)$ кристаллической решетки столбчатых B2-зерен, тогда, как после НСЭП-обработки с $n=5$ главной причиной повышения этих же параметров является изменение химического (элементного) состава (обеднения никелем) B2-фазы в поверхностном слое образца. Изменение химического состава матричной фазы приводит к повышению температур мартенситных превращений и, как следствие, к более полной реализации механизмов неупругого накопления деформации, обусловленной этими превращениями, а также накоплению большей по величине пластической деформации в более мягкой мартенситной фазе.

Исходная аттестация образцов, механические испытания на растяжение образцов выполнены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.2; исследования микротвердости и электронно-микроскопический анализ поверхностей разрушения выполнены при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00551

Секция 8. Сварка, родственные процессы
и технологии для создания технических систем
ответственного и специального назначения,
в том числе для эксплуатации в экстремальных
условиях и низких климатических температур
Арктики и Крайнего Севера

DOI: 10.17223/9785946218412/388

EFFECT OF PRE-STRAIN ROLLING PATH ON ABNORMAL GRAIN GROWTH IN FRICTION-STIR WELDED AL-MG-SI ALLOY

Vysotskiy I., Malopheyev S., Mironov S., Kaibyshev R.
Belgorod State University, Belgorod, Russia

Ultrafine-grained structure in stir zone of Al-Mg-Si sheets joined by double-side friction stir welding exhibits abnormal grain growth during post-weld heat treatment. To suppress AGG the welds were cold-rolled in two different directions - parallel welding direction and perpendicular direction to the weld line. At pre-strain rolling in the parallel direction, the mean grain size in the stir zone after post-weld heat treatment was about 45 μm . At other pre-strain rolling path, the mean grain size in the stir zone after post-weld heat treatment was about 80 μm .

This study was financially supported by the Russian Science Foundation, grant No. 19-49-02001. The authors are grateful to the staff of the Joint Research Center, «Technology and Materials» Belgorod State National Research University for their assistance with the mechanical and structural characterizations.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

DOI: 10.17223/9785946218412/389

FORMATION OF ULTRAFINE-GRAINED STRUCTURE IN AL-MG-MN-ZR SHEETS BY SEVERE PLASTIC DEFORMATION AND SUBSEQUENT ROLLING

Vysotskiy I., Malopheyev S., Mironov S., Kaibyshev R.

Belgorod State University, Belgorod, Russia

The effect of cold rolling and subsequent annealing on microstructure and mechanical properties of ultrafine-grained Al-Mg-Mn-Zr aluminum alloy was studied. The ultrafine-grained structure was produced by equal-channel angular pressing (ECAP) applied at 300 °C to true strain of ~12 and subsequent water quenching. This resulted in fully recrystallized equiaxed structure with an average size ~1 μm. To obtain a sheet semi-product ultrafine-grained alloy was subjected to cold rolling to full hardened condition and stabilized by annealing at 300 °C. The microstructure and mechanical properties of the obtained rolled sheets are studied.

This study was financially supported by the Russian Science Foundation, grant No. 18-79-10174. The authors are grateful to the staff of the Joint Research Center, «Technology and Materials» Belgorod State National Research University for their assistance with the mechanical and structural characterizations.

DOI: 10.17223/9785946218412/390

TENSILE BEHAVIOR OF FRICTION-STIR WELDED Al-Mg-Si ALLOY

Vysotskiy I., Malopheyev S., Mironov S., Kaibyshev R.

Belgorod State University, Belgorod, Russia

In this work, digital-image-correlation technique was applied to examine an evolution of strain distribution during transverse tensile tests of friction-stir welded (FSW) Al-Mg-Si alloy. Due to sharp thermal- as well as strain gradients inherent to FSW process, the microstructure distribution within the welds is usually heterogeneous and thus the mechanical response is expected to be not uniform. Indeed, the tensile strain was found to preferentially concentrate in heat-affected zone, presumably due coarsening of strengthening precipitates in this microstructural region and the concomitant material softening. With subsequent tensile deformation, however, the strain also expanded to a relatively hard stir zone and this observation was attributed to a work hardening effect. Nevertheless, the tensile strain was shown to have highly localized character and this resulted in premature failure of the welds.

This work is supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation under the agreement №14.584.21.0023 (ID number RFMEFI58417X0023). The authors are grateful to the staff of the Joint Research Center, «Technology and Materials» Belgorod State National Research University for their assistance with the mechanical and structural characterizations.

DOI: 10.17223/9785946218412/391

ПОВЫШЕНИЕ СВОЙСТВ МЕДНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КОНТАКТА ЗА СЧЕТ ЕГО ОБРАБОТКИ ПЛАЗМОЙ, СФОРМИРОВАННОЙ ПРИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ВЗРЫВЕ ФОЛЬГИ СЕРЕБРА С НАВЕСКОЙ ПОРОШКА ОКСИДА ЦИНКА

¹Романов Д.А., ¹Московский С.В., ²Иванов Ю.Ф., ¹Громов В.Е., ¹Соснин К.В., ¹Филяков А.Д.

¹*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк*

²*Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск*

Объектом исследований являлись медные электрические контакты электромагнитного пускателя CJ20, на контактных поверхностях которых электровзрывным методом было сформировано электровзрывное покрытие системы ZnO-Ag. В качестве взрываемого токопроводящего материала была использована фольга серебра массой 250 мг, на поверхность которой в область взрыва помещалась навеска порошка ZnO массой 80 мг. Время воздействия плазмы на поверхность образца ~100 мкс, поглощаемая плотность мощности на оси струи ~5,5 ГВт/м², давление в ударно-сжатом слое вблизи облучаемой поверхности ~12,5 МПа, остаточное давление газа в рабочей камере ~100 Па; температура плазмы на срезе сопла ~10⁴ К, толщина зоны термического влияния ~50 мкм. Исследования элементного и фазового состава, состояния дефектной субструктуры поверхностного слоя, сформированного в результате электровзрывного напыления (ЭВН), проводили методами сканирующей электронной микроскопии (прибор Carl Zeiss EVO50, оснащенный микроанализатором EDAX), просвечивающей дифракционной электронной микроскопии тонких фольг (прибор JEOL JEM-2100 F) и атомно-силовой микроскопии (прибор Solver NEXT). Фольги изготавливали методами ионного утонения пластинок, вырезанных в плоскости, расположенной перпендикулярно поверхности модифицирования. Свойства материала характеризовали нанотвердостью и модулем Юнга (нанотвердомер DUN-211S (Shimadzu, Япония), нагрузка на индентор 30 мН). Атомно-силовую микроскопию проводили в слое покрытия, расположенном на расстоянии 10 мкм от поверхности покрытия, а также на границе раздела между покрытием и медной подложкой. Трибологические исследования (определение износостойкости и коэффициента трения) проводили на трибометре Pin on Disc and Oscillating TRIBOtester (TRIBOtechnic, Франция) при следующих параметрах: шарик из твердого сплава ВК6 диаметром 6 мм, радиус трека – 3 мм, нагрузка на индентор 3 Н; длина трека варьировалась в зависимости от уровня износостойкости исследуемого материала. Испытания на электроэрозионную стойкость покрытий в условиях дуговой эрозии проводили на контактах электромагнитных пускателей марки CJ20 при переменном токе и индуктивной нагрузке в соответствии с требованиями режима испытаний АС-3 на коммутационную износостойкость при работе в трехфазной цепи со значением низкого напряжения 400/230 В, частотой 50 Гц для тока до 320 А и $\cos\varphi = 0,35$ и числе коммутационных циклов 6000.

Механические свойства модифицированного слоя меди характеризовали нанотвердостью. Нанотвердость и модуль Юнга определяли на поперечных шлифах, проводя индентирование вдоль прямой, расположенной параллельно поверхности модифицирования на расстоянии ~15 мкм от поверхности обработки. Результаты выполненных испытаний показали, что твердость электровзрывного покрытия изменяется в пределах от 750 МПа до 2250 МПа при среднем значении твердости 1600 МПа, что в 3,8 раза превышает микротвердость отожженной меди. Модуль Юнга электровзрывного покрытия изменяется в пределах от 56,1 ГПа до 89,0 ГПа при среднем значении модуля 75,1 ГПа. Отметим, что модуль Юнга отожженной меди изменяется в пределах (110-130) ГПа, модуль Юнга серебра 80 ГПа. ЭВН меди сопровождается незначительным (в ~1,1 раза) увеличением износостойкости модифицированного слоя; коэффициент трения при этом повышается в ~1,3 раза. Обращает на себя внимание изменение коэффициента трения в процессе трибологических испытаний. А именно, на начальной стадии испытаний коэффициент трения модифицированной поверхности существенно ниже коэффициента трения исходной меди. Последнее может свидетельствовать о том, что упрочненный слой тонкий и быстро теряет свои износостойкие свойства.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

Повышение электрического сопротивления в ходе испытаний электровзрывных покрытий системы ZnO-Ag на коммутационную износостойкость вызвано испарением легкоплавкой серебряной матрицы под воздействием электрической дуги и обогащением поверхности покрытия частицами ZnO. Электрические контакты, упрочнённые электровзрывными покрытиями системы ZnO-Ag способны к механической очистке поверхности от частиц ZnO. Сформированные покрытия системы ZnO-Ag удовлетворяют испытаниям пускателей на коммутационную износостойкость.

Дефектную субструктуру электровзрывного покрытия системы ZnO-Ag изучали путем анализа поперечных травленных шлифов. Установлено, что ЭВН меди сопровождается формированием многослойной структуры. Толщина поверхностного слоя, имеющего субмикроструктурную (150-230 нм) структуру, изменяется в широких пределах и варьируется от 30 мкм до 60 мкм. Поверхностный слой отделен от слоя термического влияния переходным слоем толщиной (1,0-1,3) мкм. Следует отметить, что переходный слой содержит большое количество микропор. Методами микрорентгеноспектрального анализа выполнены исследования элементного состава модифицированного слоя медного электрического контакта. Результаты исследований свидетельствуют о том, что серебро является основным элементом поверхностного слоя. В переходном слое концентрация атомов серебра быстро снижается и в основном объеме медного электрического контакта атомы серебра обнаружены в минимальном количестве. Фазовый и элементный состав, состояние дефектной субструктуры медного электрического контакта, подвергнутого ЭВН покрытия системы ZnO-Ag, анализировали методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии тонких фольг. Выполненные исследования показывают, что в поверхностном слое толщиной до 60 мкм формируется, независимо от расстояния до поверхности облучения, структура высокоскоростной ячеистой кристаллизации. Ячейки имеют округлую форму. Размер ячеек изменяется в пределах от 150 нм до 400 нм. Ячейки разделены прослойками, толщина которых изменяется в пределах от 15 нм до 50 нм. В объеме ячеек выявляется дислокационная субструктура в виде хаотически распределенных дислокаций. Скалярная плотность дислокаций $\approx 2,1 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Переходный слой имеет структуру дендритной кристаллизации со стороны слоя электровзрывного напыления и структуру пластинчатого типа со стороны слоя термического влияния. Слой термического влияния медного электрического контакта имеет зеренно-субзеренную структуру. В объеме зерен меди наблюдается дислокационная субструктура в виде хаотически распределенных дислокаций. Величина скалярной плотности дислокаций составляет $\approx 1,3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Следует отметить, что на электронно-микроскопическом изображении структуры слоя термического влияния присутствует большое количество изгибных экстинкционных контуров, что указывает на высокий уровень кривизны-кручения материала, обусловленный внутренними полями напряжений. Распределение атомов серебра, цинка и кислорода в электровзрывном покрытии изучали методами микрорентгеноспектрального анализа тонких фольг. В структуре высокоскоростной ячеистой кристаллизации, образующейся в поверхностном слое, объем ячеек сформирован преимущественно атомами серебра, атомы цинка и кислорода расположены преимущественно по границам ячеек, формируя протяженные прослойки. В структуре переходного слоя (слоя с дендритной кристаллизацией) атомы серебра и цинка располагаются преимущественно вдоль границ дендритов.

Полученные в настоящей работе результаты позволяют предположить, что увеличение прочностных (нанотвердость), электроэрозионная стойкость и трибологических (износостойкость) свойств и электроэрозионной стойкости медного электрического контакта, подвергнутого электровзрывному напылению покрытия системы ZnO-Ag, обусловлено формированием в поверхностном слое многоэлементного многофазного субмикронаноразмерного состояния, обогащенного атомами различных элементов.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 18-79-00013).

DOI: 10.17223/9785946218412/392

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНЫХ ЦИРКОНИЕВЫХ ПОКРЫТИЙ, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНОВЫХ ИМПЛАНТАТОВ

¹Соснин К.В., ¹Романов Д.А., ²Иванов Ю.Ф., ¹Громов В.Е., ¹Филяков А.Д., ¹Будовских Е.А.

¹*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк*

²*Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск*

В настоящее время медицинские имплантаты активно используются для вживления в организм в роли протезов, либо в качестве идентификатора. Исследование физико-химических и морфологических свойств, структуры имплантатов является одной из приоритетных задач физики конденсированного состояния и медицинского материаловедения. В качестве подложки использовали дентальный имплантат из сплава титана марки ВТ6. Методами сканирующей электронной микроскопии проведены исследования структуры и элементного состава поперечного шлифа системы «покрытие/подложка» сформированной электровзрывным методом. По морфологии структуры и контрасту травления формирующееся покрытие можно условно разделить на два подслоя. Вблизи границы раздела подслоя №1 имеет столбчатое строение; подслоя №2 – дендритное строение. Можно предположить, что подслоя №2 был сформирован в результате плавления и последующей скоростной кристаллизации поверхностного слоя подложки (сплав на основе титана), инициированным налетающим потоком плазмы, образовавшейся в результате электрического взрыва титановой фольги с расплавленным на ней порошком циркония. Подслоя №1 является собственно покрытием системы Ti-Zr.

Элементный состав покрытия анализировали методами микрорентгеноспектрального анализа. Микрорентгеноспектральный анализ элементного состава по точкам выявил присутствие, наряду с атомами титана и циркония, атомов других элементов. Наряду с элементами, характерными для сплава на основе титана, в покрытии присутствуют атомы углерода и кислорода. Характерно, что атомы углерода выявлены исключительно в поверхностном слое, а атомы кислорода присутствуют по всей глубине покрытия. Основываясь на результатах элементного анализа можно предположить, что сформированное покрытие является многофазным и должно содержать, наряду со сплавом Ti-Zr, карбидные и оксидные фазы.

Фазовый состав поверхностного слоя покрытия изучали методами рентгеноструктурного анализа. Выполненные исследования выявили присутствие в поверхностном слое покрытия трех фаз: основной является α -модификация сплава TiZr (81,3 объемных %), в существенно меньшем объеме присутствуют оксид циркония ZrO (9,5 объемных %) и карбид титана TiC (9,2 объемных %). Таким образом, полученные методом рентгенофазового анализа результаты хорошо согласуются с результатами микрорентгеноспектрального анализа. Присутствие в поверхностном слое покрытия оксидной и карбидной фаз обусловлено, очевидно, техническим вакуумом рабочей камеры установки электровзрывного легирования и применением графитового электрода.

Дефектную субструктуру покрытия исследовали методами просвечивающей электронной микроскопии тонких фольг. Фольги готовили методами ионного распыления пластинок, вырезанных из объема образца в поперечном сечении покрытия. Такое расположение фольги позволяло провести анализ структуры материала на различном расстоянии от поверхности покрытия. Слой, формирующий поверхность покрытия, имеет нанокристаллическую структуру, размеры кристаллитов которой изменяются в пределах от 20 нм до 100 нм. Нижележащий слой толщиной до 30 мкм имеет субмикроструктурную структуру. Размер кристаллитов, формирующих данный подслоя изменяется в пределах от 200 нм до 450 нм. Слой, расположенный на большем удалении от поверхности покрытия, имеет бимодальную структуру.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00075 мол_а.

DOI: 10.17223/9785946218412/393

ВЛИЯНИЕ СВАРКИ МОДУЛИРОВАННЫМ ТОКОМ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ СТАЛИ АУСТЕНИТНОГО КЛАССА 12Х18Н10Т

^{1,2}Смирнов А.Н., ³Попова Н.А., ^{3,4}Никоненко Е.Л.,

¹Абабков Н.В., ¹Князьков К.В., ³Конева Н.А.

¹Кузбасский государственный технический университет им. Т.Ф. Горбачева, Кемерово

²ООО «Кузбасский центр сварки и контроля», Кемерово

³Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск

⁴Национальный исследовательский Томский государственный политехнический

Методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии на тонких фольгах проведено исследование структурно-фазового состояния зоны термического влияния сварного шва, выполненного модулированным током (мелкокапельный перенос) на стали аустенитного класса 12Х18Н10Т. Сварка выполнялась на установке УДИ-203 плавящимся электродом марки ЦЛ-11. Режимы сварки: ток и время импульса 75 А, 0.15 сек, ток и время паузы 15 А, 0.45 сек, средний ток при сварке – 42 А (мелкокапельный перенос). Сварка проводилась на плоских образцах размером 200 × 15 × 4 мм³. Рабочая плоскость образца 200 × 15 мм² располагалась по толщине листа. Ширина зоны переплавленного металла не превышала 12 мм, размер зоны термического влияния – не более 5 мм. Исследования выполнялись в зоне термического влияния на расстоянии 1 мм от линии сплавления в сторону основного металла – *зона основного металла* и на расстоянии 0.5 мм в сторону наплавленного металла – *зона наплавленного металла*.

Установлено, что в состоянии перед сваркой матрица стали представляет собой γ -фазу (аустенит), имеющий гранцентрированную кубическую кристаллическую решетку. Морфологически структура стали представляет зерна γ -фазы (аустенита) с различной дефектной структурой: 1) зерна, дефектная структура в которых представлена только сетчатой дислокационной субструктурой, и 2) зерна, в которых наряду с дислокационной субструктурой присутствуют механические (или деформационные) микродвойники в виде пакетов одной, двух и трех систем. Каждый пакет состоит из групп параллельных микродвойников, плотно расположенных, с заполнением объема между ними матричным γ -материалом. Микродвойники обладают ГЦК кристаллической решеткой с параметром, равным параметру кристаллической решетки γ -фазы. Выделение микродвойников происходит по плоскостям {111} γ -фазы (плоскость габитуса).

После сварки модулированным током (мелкокапельный перенос) матрица стали *в зоне основного металла*, как и перед сваркой, представляет собой γ -фазу (аустенит). Однако теперь аустенит (γ -фаза) присутствует в виде зерен четырех типов: 1) зерна, дефектная структура в которых, как и в исходном материале, представлена только сетчатой дислокационной субструктурой; 2) зерна, в которых наряду с дислокационной сетчатой субструктурой присутствуют механические (или деформационные) микродвойники, но преимущественно только одной системы; 3) зерна, в которых дислокационная субструктура фрагментирована, и в стыках и на границах дислокационных фрагментов присутствуют частицы ϵ -мартенсита, и 4) зерна, в которых наряду с дислокационной фрагментированной субструктурой присутствует ϵ -мартенсит, частицы которого находятся на границах микродвойников.

В зоне наплавленного металла также матрицей стали являлась γ -фаза (аустенит). Но, в отличие от зоны основного металла, в структуре не встречается зерен γ -фазы, в которых присутствуют только дислокации в виде сеток.

Таким образом, сварка модулированным током (мелкокапельный перенос) приводит к образованию ϵ -мартенсита как в зоне основного (свариваемого) металла, так и в зоне наплавленного металла (металла шва), причем в зоне наплавленного металла фазовое превращение $\gamma \rightarrow \delta \rightarrow \epsilon$ проходит, во-первых, во всех зернах γ -фазы и, во-вторых, более интенсивно.

DOI: 10.17223/9785946218412/394

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИМПУЛЬСНО-ДУГОВОЙ НАПЛАВКИ С ПОДОГРЕВОМ ЭЛЕКТРОДНОЙ ПРОВОЛОКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА НАПЛАВЛЕННЫХ СЛОЕВ

¹Крампит М.А., ¹Кузнецов М.А., ²Данилов В.И., ³Крампит А.Г., ²Шляхова Г.В.

¹ Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского Томского политехнического университета, Юрга

² Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

³АО «НПП «Исток» им. Шокина», Фрязино

Одним из самых доступных способов нанесения защитных и упрочняющих слоев из материалов с особыми свойствами на широко распространенные недорогие углеродистые стали является дуговая наплавка в среде защитных газов плавящимся электродом, сочетающая в себе доступность оборудования, высокую производительность и возможность автоматизации. Но существует проблема с фазовым совершенством наплавленного слоя, так как для повышения производительности необходимо увеличивать силу сварочного тока, что в свою очередь приводит к усилению перемешивания и загрязнению слоя основным металлом. Задача может быть решена путем предварительного подогрева электродной проволоки, что позволит снизить силу сварочного тока, а следовательно, уменьшить перемешивающее воздействие дуги на сварочную ванну.

Исследовался процесс наплавки MIG-сваркой антикоррозионного слоя из стали 12X18H9T на сталь 20. Наплавка производилась с обратной связью по напряжению в паузе. Импульс тока накладывался на дежурную дугу при снижении порогового напряжения ниже 16 В или спустя 25 мс. Сначала был наплавлен контрольный валик без подогрева электродной проволоки при следующих параметрах: средний ток - 73.8 А, среднее напряжение - 22.2 В, скорость подачи проволоки - 108 м/ч, что обеспечивало коэффициент расплавления 16.8 г/А·ч., глубину проплавления – 0.57 мм и долю основного металла в наплавке - 15%.

В последующих сериях эксперимента сварочная проволока подогревалась токами 19 А и 22 А до 250 °С и 400 °С соответственно. Варьировались ток и длительность импульса сварочной дуги.

Параметры процессов наплавки при подогреве током 19 А представлены в таблице 1. Подогрев сварочной проволоки позволил увеличить скорость ее подачи в среднем на 35%. При этом удалось в среднем на 50% увеличить коэффициент расплавления и снизить тепловложение: средние значения напряжения и тока заметно уменьшились. Исследование макроструктуры наплавленных валиков показало, что режимы наплавки с подогревом сварочной проволоки позволяют решить основную задачу – повысить фазовое совершенство наплавленных слоев.

Таблица 1. Режимы наплавки. Подогрев 19 А

Номер эксперимента	Средняя сила тока, А	Среднее напряжение, В	Ток импульса, А	Длительность импульса, мс	Скорость подачи проволоки, м/ч	Доля включений основного металла, %	Коэффициент расплавления, г/А ч
1	69.9	20.9	70	5.0	154.8	5.39	25.4
2	68.4	20.9	80	4.0	144	4.83	24.0
3	70.1	21.3	80	5.0	144	4.56	23.5
4	56.8	26.8	100	3.0	144	14.4	29.0

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

Так доля включений основного металла в наплавленном слое, уменьшилась, исключая режим 4, почти в три раза. Кроме того, исследуемые режимы обеспечивают малую глубину проплавления < 0.5 мм и небольшую ширину зоны термического влияния (ЗТВ) ≤ 2 мм. Наилучшие результаты получены при использовании режима 3. Здесь доля включений основного металла наименьшая - 4.56 %, наименьшая глубина проплавления - 0.34 мм, приемлемая ширина ЗТВ - 2.0 мм и достаточно высокий коэффициент расплавления - 23.5 г/А ч. Использование режима 4 нерационально, так как процесс наплавки нестабилен, происходит выгорание легирующих элементов, и значительное перемешивание основного и наплаваемого металла, глубина проплавления достигает 0.71 мм.

В таблице 2 приведены параметры процессов наплавки при подогреве сварочной проволоки током 22 А. По сравнению с предыдущей серии экспериментов ожидаемо увеличились средняя сила тока и среднее напряжение, что позволило увеличить скорость подачи проволоки. При этом коэффициент расплавления практически не изменился, а перемешивание с основным металлом заметно усилилось.

Таблица 3. Режимы наплавки. Подогрев 22 А

Номер эксперимента	Средняя сила тока, А	Среднее напряжение, В	Ток импульса, А	Длительность импульса, мс	Скорость подачи проволоки, м/ч	Доля включений основного металла, %	Коэффициент расплавления, г/А ч
5	73.9	21.4	70	5.0	154.8	8.1	24
6	69.4	22.9	80	4.0	154.8	12.1	25.5
7	69.7	23.1	80	5.0	154.8	8.9	25.4
8	66.1	24.4	100	3.0	144	20.0	24.7

Глубина проплавления при подогреве током 22 А оказалась в полтора-два раза больше, чем в режимах с подогревом током 19 А. Увеличилась и ширина ЗТВ в среднем до 2,5 мм. Наилучшим в данной серии представляется режим 5, где наименьшая глубина проплавления - 0,55 мм, наименьшая ширина ЗТВ - 1,8 мм, наименьшая доля основного металла в наплавленном слое - 8,1 % и достаточно высокий коэффициент расплавления - 24 г/А ч. Однако и он уступает режиму 3, особенно по доле включений основного металла. Режим 8 (сварка с током импульса 100 А), как и в предыдущей серии характеризуется нестабильностью, выгоранием легирующих элементов, большой глубиной проплавления, превышающей 1 мм, и самым большим (20 %) загрязнением наплаваемого слоя основным металлом, которое больше чем в контрольном эксперименте без подогрева. Поэтому данный режим не может быть рекомендован к применению.

Таким образом, наплавка с подогревом электродной проволоки током 19 А позволяет повысить коэффициент расплавления электродного металла в среднем на 40% в сравнении с аналогичным режимом, но без подогрева. Ввод дополнительной энергии для подогрева электродной проволоки снижает необходимую энергию для плавления проволоки и формирования капли. При одинаковой частоте каплепереноса в режимах без подогрева проволоки в импульсе будет происходить как окончательное формирование капли, так и перенос. В режиме с подогревом электродной проволоки капля будет сформирована на этапе паузы, так что требуются меньшие энергетические параметры импульса, который служит только для переноса электродного металла. Эти факторы позволяют увеличить скорость подачи проволоки, уменьшить перемешивание с основным металлом и улучшить геометрические параметры наплаваемого слоя.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.1.2, при частичной поддержке грантом РФФИ № 19-38-50015.

DOI: 10.17223/9785946218412/395

СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ СТАЛИ 12Х18Н9Т ПОСЛЕ ЛЕГИРОВАНИЯ БОРОМ И МЕ(Cr, Ni, Fe) ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ ОБРАБОТКЕ

Бушуева Е. Г., Рябинкина П.А., Батаев В.А.

Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск

Хромоникелевые аустенитные стали находят широкое применение во многих областях промышленности в качестве конструкционных и инструментальных материалов благодаря благоприятному сочетанию комплекса свойств, такие как - высокая устойчивость к коррозии, технологичность, жаростойкость, относительная дешевизна. Также эти стали популярны в аддитивном производстве и используются в виде порошков. Микроструктура изделий из данных сталей, полученных методами аддитивного производства, состоит из γ -аустенита и δ -феррита. Основными способами получения изделий являются технологии, основанные на плавлении порошка с использованием высокоэнергетических источников. Однако аддитивное производство изделий из железуглеродистых сплавов столкнулось с рядом проблем. Так, например, основным элементом нержавеющей стали – железо, и ее первичный легирующий элемент – хром, имеют высокое сродство к кислороду, что приводит к значительному окислению при нормальных условиях обработки [1]. Такое окисление приводит к возникновению явлений комкования из-за присутствия загрязняющих оксидных слоев на поверхности расплава [2]. Чаще всего для формирования стальных изделий используется метод лазерного спекания. Однако готовые изделия характеризуются повышенной пористостью [3,4]. Микроструктура деталей гетерогенна, не имеет эпитаксиальной морфологии и содержит тонкие карбидные сетки. Наиболее благоприятная микроструктура может быть сформирована при селективном лазерном спекании [2] или методом электроннолучевого плавления [5, 6, 7].

Также следует отметить, что существенным недостатком стали данного класса является низкое сопротивление воздействию абразивных частиц. Поэтому изделия, сформированные из этой стали при использовании аддитивных технологий могут иметь низкую износостойкость.

Следовательно, целью исследования может быть изучение влияния технологии получения материала на основе стали 12Х18Н9Т, в частности электронно-лучевая обработка, на качество, структуру, износостойкость свойства.

Результаты металлографических исследований образцов показали, что при использовании разных смачивающих компонентов структура покрытия значительно отличается.

Результаты металлографических исследований свидетельствуют о высоком качестве сформированных покрытий. В структуре модифицированных слоев отсутствуют дефекты в виде пор, газовых раковин, трещин, встречающиеся при реализации металлургических процессов в ходе наплавки. Установлено, что с увеличением тока пучка электронов от 22 до 24 мА толщина покрытия увеличивается от 2,3 до 3 мм.

При наплавке порошка аморфного бора в поверхностных слоях хромоникелевой аустенитной стали формируются покрытия с расположением боридов в пластинчатой эвтектике, содержание которой разное при изменении смачивающего компонента. Минимальное количество при использовании железа (доля эвтектики около 10%), максимальное при использовании никеля (80%). Данная структура, состоящая из пластин высокопрочных боридов хрома и пластичного γ -твердого раствора на основе железа способствует повышению жаростойкости наплавленных слоев, и износостойкости. Рентгенофазовый анализ подтверждает металлографические исследования.

Результаты исследования микротвердости сформированных покрытий показывают различие в микротвердости смежных микрообъемов упрочненного слоя превышает ~600 МПа.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

Максимальная микротвердость (1200 МПа) характерна для покрытий, наплавленных при использовании железа в качестве смачивающего компонента, минимальная (700 МПа) для никеля. Это объясняется значительным увеличением доли эвтектики в структуре покрытия.

Формирование плотного боридного слоя на поверхности хромоникелевой стали благоприятно отражается на поведении материала в процессе изнашивания. При изнашивании в условиях воздействия закрепленных частиц абразива зафиксировано повышение износостойкости наплавленных покрытий в 2-5 раза, в зависимости от смачивающего компонента, по сравнению с износостойкостью основного металла.

Вневакуумная электронно-лучевая наплавка борсодержащих порошковых смесей и разных смачивающих компонентов на хромоникелевую аустенитную сталь 12Х18Н9Т позволяет сформировать износостойкие покрытия толщиной до 3мм. В условиях воздействия закрепленными частицами абразива относительная износостойкость упрочненных слоев в 2-5 раза превышает износостойкость хромоникелевой стали 12Х18Н9Т. Наилучшие показатели характерны для покрытий, полученных при наплавке с использованием железа в качестве смачивающего компонента.

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.610.21.0013, идентификатор проекта RFMEFI61017X0013).

1. Das S. Physical Aspects of Process Control in Selective Laser Sintering of Metals // *Advanced Engineering Materials*. – 2003. – Vol. 5, iss. 10. – P. 701-711
2. Gu D., Shen Y. Balling phenomena in direct laser sintering of stainless steel powder: Metallurgical mechanisms and control methods // *Mater. Design*. – 2009. – Vol. 30, iss. 8. – P. 2903-2910
3. Investigation on multi-layer direct metal laser sintering of 316L stainless steel powder beds / W. O'Neill, C.J. Sutcliffe, R. Morgan, A. Landsborough, K.K.B. Hon // *CIRP Annals - Manufacturing Technology*. – 1999. – Vol. 48, iss. 1. – P. 151-154
4. Simchi A., Pohl H. Effects of laser sintering processing parameters on the microstructure and densification of iron powder // *Mat. Sci. Eng. A*. – 2003. – Vol. 359, iss. 1-2. – P. 119-128
5. Additive manufacturing of 316L stainless steel by electron beam melting for nuclear fusion applications / Y. Zhong, L.E. Rännar, L. Liu, A. Koptug, S. Wikman, J. Olsen, D. Cui, Z. Shen // *Journal of Nuclear Materials*. – 2017. – Vol. 486, iss. – P. 234-245
6. Wanjara P., Brochu M., Jahazi M. Electron beam freeforming of stainless steel using solid wire feed // *Mater. Design*. – 2007. – Vol. 28, iss. 8. – P. 2278-2286
7. Almangour B., Grzesiak D., Yang J.M. Rapid fabrication of bulk-form TiB₂/316L stainless steel nanocomposites with novel reinforcement architecture and improved performance by selective laser melting // *J. Alloy. Compd.* – 2016. – Vol. 680, iss. – P. 480-493

DOI: 10.17223/9785946218412/396

**ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУР ЗОНЫ ТЕРМИЧЕСКОГО ВЛИЯНИЯ
НЕРАЗЪЕМНОГО СОЕДИНЕНИЯ, ПОЛУЧЕННОГО АВТОМАТИЧЕСКОЙ
СВАРКОЙ ПОД СЛОЕМ ФЛЮСА ПОРОШКОВОЙ ПРОВОЛОКОЙ С ТЕРМИТНЫМ
НАПОЛНИТЕЛЕМ**

¹Абашкин Е.Е., ¹Жилин С.Г., ¹Комаров О.Н.

¹*Институт машиноведения и металлургии ДВО РАН, Комсомольск-на-Амуре*

Формирование прочного неразъемного соединения стальных элементов конструкций при минимальных энергетических и материальных затратах представляется актуальной производственной задачей. Достижение высоких прочностных характеристик таких соединений возможно в процессе сварки с использованием агрегатов автоматической дуговой сварки под слоем флюса (АДФ), преимуществами которых являются: высокая технологичность, независимость от квалификации исполнителя работ, защищенность сварочной ванны от взаимодействия с окружающей средой, потери на угар и разбрызгивания и др. Для реализации процесса используются непрерывные электроды в виде проволоки сплошного сечения или порошковых проволок в виде трубки с сердечником из смеси минералов, ферросплавов, специальных химических добавок и др.

Однако, в ряде случаев, даже при сварке низкоуглеродистых и низколегированных сталей для обеспечения химической однородности, конструктивной прочности и объема наплавленного металла приходится увеличивать энергоемкость и число проходов электродом зон стыка, что приводит к потерям в качестве соединения. Требуемая прочность соединения достигается, как правило, при значительном количестве проходов электрода с уменьшением вводимой энергии электрической дуги, что приводит к образованию множества слоев в структуре шва, отличающегося мелким размером зерна. Теплофизические особенности формирования зоны сплавления в значительной степени определяют иерархию структуры металла зоны термического влияния в направлении от центра шва к периферии с характерными участками перегрева, перекристаллизации и т.д. Существенные различия структур и размеров зерна отмеченных выше участков зоны термического влияния также во многом зависят от скорости отведения тепла при остывании получаемого неразъемного соединения. Традиционно считается, что минимизация протяженности зона сварного шва приводит к формированию надёжного и качественного сварного соединения [1].

Возможность реализации ресурсоэффективного способа получения неразъемного соединения элементов, выполненных из низкоуглеродистых и низколегированных сталей, с обеспечением требуемых прочностных и материаловедческих характеристик видится в использовании порошковой проволоки с алюмотермитным наполнителем для агрегатов АДФ [2]. Наполнитель такой проволоки преимущественно состоит из смеси фракций металлической окалины и алюминиевого сплава с добавлением лигатур. Значительная доля компонентов порошкового наполнителя является промышленными отходами. Применение такой порошковой проволоки обусловлено возможностью внесения доли тепла в процесс нагрева зоны соединения деталей за счет экзотермической окислительно-восстановительной реакция, в ходе которой происходит восстановление железа из окалины с получением термитной стали [3, 4]. Таким образом реализуется возможность использования энергий электрической дуги и алюмотермитной реакции в ходе получения неразъемного соединения. Дополнительная тепловая энергия экзотермической реакции способствует равномерному наполнению сварочной ванны, а дополнительные теплоизоляционные свойства образовавшегося за счет такой реакции шлака приводят к более медленному, но более равномерному затвердеванию (кристаллизации) материала шва. Кроме того, применение процесса направлено на сокращение производственных издержек, связанных с рядом подготовительных операций: обработкой поверхности, прокатки сварочных материалов и др. Серией предварительных экспериментов установлено, что при использовании АДФ агрегата с

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

порошковой алюмотермитной проволокой в результате замедленного теплоотведения от соединения возможно снижение уровня остаточных напряжений без потерь прочности металла зоны термического влияния [5].

В связи с отмеченным выше целью эксперимента стало определение эффективного теплового режима воздействия на зону сплавления элементов металлоконструкции из углеродистых сталей, получаемого при совместном электродуговом и алюмотермическом воздействии на формирование структуры и физико-механических свойств наплавленного металла и зоны термического влияния.

В рамках поставленной цели решались следующие задачи:

- получение сварного соединения пластин из Ст3сп и стали 45 «за один проход» электрода в виде алюмотермитной порошковой проволоки при различных параметрах теплового воздействия в автоматическом режиме сварки под флюсом;

- исследование структуры зон шва и термического влияния, зонального и химического составов;

- определение физико-механических свойств получаемых соединений;

- на основании комплекса полученных результатов исследований определение наиболее технологически приемлемого теплового режима соединения пластин из углеродистых сталей сваркой АДФ агрегатом проволокой сплошного сечения.

В результате проведенных экспериментов установлено, что достижение прочностных характеристик материала шва $\sigma_b = 360\div 470$ МПа и $\sigma_t = 250\div 350$ МПа, наплаваемого на пластины из Ст3сп, достигается при тепловой мощности дуги $q = 7,5\div 8,8$ кДж/с и скорости перемещения электрода $V = 16\div 22$ м/ч. В зоне термического влияния образуется феррито-перлитная структура. Длина зоны термического влияния составила 10 миллиметров. Размер зерна структуры металла полученного соединения уменьшается от центра к периферии.

При получении соединений пластин из стали 45 результаты $\sigma_b = 598$ МПа и $\sigma_t = 417$ МПа достигаются при использовании диапазона значений тепловой мощности дуги $q = 9,5$ кДж/с и скорости перемещения электрода $V = 20$ м/ч. Характер разрушения образцов – вязкий. В зоне термического влияния образуется феррито-перлитная структура. Длина зоны термического влияния составила 14 миллиметров. Размер зерна в зоне нормализации резко уменьшается, это обуславливается режимом теплового воздействия и склонностью к самозакаливанию стали 45.

*Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-00414-19-00

1. Лившиц, Л.С. Металловедение сварки и термическая обработка сварных соединений / Л. С. Лившиц, А. Н. Хакимов – 2-е изд. Перераб. и доп. – М. : Машиностроение, 1989. – 336 с.
2. Абашкин Е.Е., Комаров О.Н., Жилин С.Г., Предеин В.В., Ткачева А.В., Панченко Г.Л. Порошковая проволока // патент на изобретение RUS 2675876 29.12.2017
3. Абашкин Е.Е., Жилин С.Г., Комаров О.Н., Богданова Н.А. Влияние теплового режима на напряженно-деформированное состояние элементов неразъемной металлоконструкции, полученных при электродуговом и алюмотермитном воздействиях // Вестник Чувашского государственного педагогического университета им. И.Я. Яковлева. Серия: Механика предельного состояния. 2018. № 3 (37). С. 58-68.
4. Абашкин Е.Е., Жилин С.Г., Комаров О.Н., Ткачева А.В. Влияние теплового режима совместного электродугового и алюмотермического воздействия на формирование структуры и свойств наплаваемого металла // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Машиностроение, материаловедение. 2018. Т. 20. № 2. С. 62-74.
5. Абашкин, Е.Е. Температурные напряжения пластины / Е. Е. Абашкин, М. Каинг, А. В. Ткачева // Вестник ЧГПУ им. И.Я. Яковлева Серия: Механика предельного состояния, 2016. – № 4 (30). – С. 24 – 32.

DOI: 10.17223/9785946218412/397

КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И СТРУКТУРНО-ФАЗОВОГО СОСТАВА ВЫСОПРОЧНЫХ ЛАЗЕРНЫХ СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1420.

¹Маликов А.Г., ¹Оришич А.М., ^{1,2}Карпов Е.В.

¹*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск*

²*Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск*

Алюминиево-литиевые сплавы обладают малой плотностью, повышенным модулем упругости и высокой прочностью по сравнению с обычными алюминиевыми сплавами и являются перспективными материалами для авиакосмической промышленности. В последнее время возникает повышенный интерес к среднепрочным алюминиево-литиевым сплавам системы Al-Mg-Li, которые являются коррозионностойкими трещиностойкими, имеют чрезвычайно низкую плотность и обладают способностью надежно свариваться [1].

В данной работе, в продолжение исследований [2,3], проведена серия экспериментальных работ по оптимизации процесса термической постобработки (закалка и искусственное старение) лазерных сварных соединений алюминиево-литиевых сплавов 1420 и 1424 системы Al-Mg-Li по температурным и временным характеристикам с целью получения значений предела прочности, предела текучести и предельного относительного удлинения, близких к соответствующим характеристикам основного сплава или равных им.

Проведены малоцикловые испытания термообработанных сварных соединений на пульсирующее растяжение при различных амплитудах нагрузки, при температурах -60, +20, +85 °С. Исследована структура поверхностей разрушения сварных швов с термообработкой и без нее после растяжения при различных амплитудах нагрузки, при повышенных и пониженных температурах.

В результате для образцов сварных соединений алюминиево-литиевого сплава 1420 системы Al-Mg-Li установлены закономерности изменения предела прочности, предела текучести и относительного удлинения от температурных и временных характеристик процесса термообработки в виде закалки и искусственного старения. Закономерности поведения кривых показывают наличие ярко выраженных максимумов и минимумов в зависимости от температурных и временных характеристик процесса термообработки.

Для сварных соединений сплава 1420 системы Al-Mg-Li режимы достижения механических характеристик (предела прочности, предела текучести), превышающие соответствующие характеристики основного сплава или равные им составили: закалка при температуре 490 °С с выдержкой 30 мин с последующим искусственным старением при температуре 170 °С с выдержкой 16 часов. Установлено изменение структурно-фазового состава образцов со сварным соединением. При оптимальных режимах термообработки в твердом растворе сварного шва для сплава 1420 системы Al-Mg-Li формируется упрочняющая фаза δ' (Al₃Li). Тем самым управляя параметрами термической обработки образцов со сварным соединением, возможно, целенаправленно влиять на формирование заданных механических свойства сварного шва за счет изменения структурно-фазового состава сварного шва.

Впервые для образцов со сварным соединением сплава 1420 системы Al-Mg-Li построены 3D-карты механических свойств (предела прочности, предела текучести, предельного относительного удлинения) в зависимости от температуры и времени старения.

Сравнение изломов сварных соединений без термообработки и с термообработкой показало, что при температуре испытаний T=85 °С на поверхности излома после усталостного растяжения присутствуют террасы, прилегающие к газовым порам. При температуре испытаний T=20 и -60 °С с необработанным швом отсутствует разрыв по границе шва и ЗТВ, характерный для термообработанного шва, где он наблюдается на значительной части поверхности излома, при необработанном шве разрушение всегда проходило внутри шва.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

В результате сравнения циклического нагружения сварных соединений без термообработки и с термообработкой установлено, что при $T=85\text{ }^{\circ}\text{C}$ для термообработанного сварного шва резко снижается усталостная долговечность по сравнению с не термообработанным. У обработанного и у необработанного шва при $T=-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ не отмечается отрицательного влияния низкой температуры на усталостную долговечность. При температуре испытаний $T=20\text{ }^{\circ}\text{C}$ предельное число циклов для необработанного шва составило 14000, а для обработанного шва при той же начальной деформации и температуре испытаний предельное число циклов равно 22000.

На основе полученных результатов можно предположить, что высокопрочные сварные соединения из сплава 1420 системы Al-Mg-Li, можно применять в ответственных сварных изделиях, работающих в интервале температур 20; $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$

1. Abd El-Aty A, Xu Y, Guo X, Zhang SH, Ma Y, Chen D. Strengthening mechanisms, deformation behavior, and anisotropic mechanical properties of Al-Li alloys: A review. // J. Adv. Res. 2018 V.10 P.49–67. doi:10.1016/j.jare.2017.12.004
2. Оришич А. М., Маликов А. Г., Карпов Е. В. и др. Исследование влияния закалки на прочностные свойства сварных соединений алюминиевых сплавов системы Al-Mg-Li, выполненных методом лазерной сварки // Международная конференция "Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций"; X Международная конференция "Химия нефти и газа": тезисы докладов. Томск. 2018. С. 524-525. DOI: 10.17223/9785946217408/338
3. Маликов А. Г., Оришич А. М., Карпов Е. В. Малоцикловые испытания лазерных сварных соединений алюминий-литиевых на пульсирующее растяжение при повышенных и пониженных температурах // Международная конференция "Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций"; X Международная конференция "Химия нефти и газа": тезисы докладов. Томск. 2018. С. 517. DOI: 10.17223/9785946217408/332

Благодарность

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда проект №17-79-20139.

DOI: 10.17223/9785946218412/398

РЕЗКА АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ ИЗЛУЧЕНИЕМ ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКОГО СО₂-ЛАЗЕРА С МОДУЛЯЦИЕЙ ДОБРОТНОСТИ В УСЛОВИЯХ РАЗВИТОГО ИСПАРЕНИЯ МАТЕРИАЛА

Шулятьев В.Б., Оришич А.М.

*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск*

Алюминиевые сплавы широко используются в авиационной промышленности и других отраслях благодаря относительно высокой прочности при малом удельном весе и коррозионной стойкости. Преимуществами лазерной резки листовых материалов является сочетание высокой скорости и высокого качества обработки, и качественная алюминиевая резка алюминиевых сплавов является актуальной задачей. Лазерная резка алюминия и сплавов затруднена из-за высокого коэффициента отражения и высокой теплопроводности материала. Поэтому для резки алюминия требуется большая мощность, чем для металлов с меньшей теплопроводностью. Большой поток тепла в материал создаёт значительную зону термического влияния и затрудняет получение качественного реза. Для уменьшения ЗТВ и шероховатости приходится обеспечивать большой расход технологического газа для удаления расплава из канала реза. Затраты на технологический газ могут составлять большую часть всех затрат на лазерную резку.

При резке алюминиевых сплавов непрерывным лазерным излучением проводят тщательную многопараметрическую оптимизацию процесса резки для получения реза с минимальной шероховатостью [1], исследуются характеристики реза в зависимости от химического состава материала [1, 2], рода технологического газа и способа формирования струи газа [2]. Во всех случаях для достижения приемлемого качества реза необходим высокий расход технологического газа. Это связано с тем, что единственным механизмом удаления расплава с фронта и из канала реза является силовое действие потока газа – расплав течёт по фронту реза и затем срывается с нижней кромки под действием сил давления и вязкого трения.

Цель настоящей работы – исследование лазерной резки алюминиевых сплавов импульсно-периодическим излучением с высокой пиковой мощностью, когда создаются условия для развитого испарения материала. При этом на поверхность расплава действует сила, вызванная импульсом отдачи паров, и расплав может выбрасываться из области взаимодействия в виде капель. Это создаёт дополнительный механизм удаления расплава с фронта и из канала реза.

Исследовалась лазерная резка алюминиевых сплавов излучением импульсно-периодического СО₂-лазера с механической модуляцией добротности с максимальной средней мощностью 4,5 кВт [3], который позволяет генерировать последовательность импульсов с пиковой мощностью до 150 кВт. При этом обеспечивается режим развитого испарения и оптический пробой вблизи поверхности мишени.

Разрезались листы из авиационных алюминиевых сплавов с содержанием лития 1420 и 1441 толщиной 1 и 1,5 мм. Структура поверхности реза и характер зависимости шероховатости поверхности от давления существенно различны при резке непрерывным и импульсно-периодическим излучением. На рис. 1 показана поверхность реза листа из сплава 1441 толщиной $t = 1$ мм при резке импульсно-периодическим излучением при частоте следования импульсов 40 кГц и непрерывным излучением при одинаковой средней мощности W излучения, скорости V , давлении P воздуха в форкамере лазерного резака и фокусном расстоянии линзы $F = 63,5$ мм.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

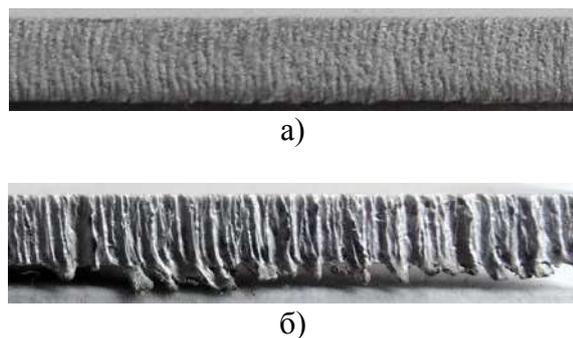


Рис. 1. Поверхность реза сплава 1441, $t = 1$ мм, $W = 1,4$ кВт, $V = 1,5$ м/мин, $P = 0,5$ кг/см², а) – импульсно-периодическое излучение, б) – непрерывное излучение.

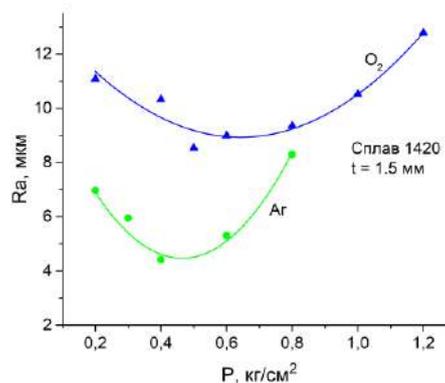


Рис. 2. Зависимость шероховатости поверхности от давления технологического газа при резке сплава 1420 импульсно периодическим излучением, $t = 1,5$ мм, $W = 1,4$ кВт, $f = 40$ кГц, $V = 1,1$ м/мин, $F = 127$ мм.

При резке непрерывным излучением наблюдается ясно выраженная бороздчатая структура с высокой шероховатостью и грат – затвердевший расплав на нижней кромке реза. При резке импульсно периодическим излучением поверхность имеет иную структуру – грат отсутствует, бороздчатая структура выражена слабо, поверхность имеет зернистую структуру, шероховатость поверхности значительно ниже. При резке импульсно периодическим излучением часть расплава выбрасывается с фронта реза в виде капель и выносится из канала реза. Часть расплава оседает в виде капель на поверхности реза, что и обуславливает его структуру. По фронту течёт значительно меньше расплава, чем при резке непрерывным режимом, поэтому борозды менее выражены, грат практически отсутствует.

На рис. 2 показана зависимость шероховатости поверхности R_a (арифметическое среднее высоты неоднородностей) от давления технологического газа в форкамере лазерного резака для кислорода и аргона. Зависимости имеют выраженный минимум, в то время как при резке непрерывным излучением при отсутствие развитого испарения, когда единственным механизмом удаления расплава является выдувание его струёй газа, зависимость является монотонной – шероховатость уменьшается с ростом давления и расхода газа. Минимум достигается при давлении газа в камере резака $0,5...0,6$ кг/см², в то время как при резке непрерывным излучением для достижения безгратового качественно реза необходимо давление $5...7$ кг/см². Применение для резки алюминиевых сплавов импульсно-периодического CO_2 -лазера с высокой пиковой мощностью позволяет существенно снизить расход технологического газа при получении качественного реза.

1. M. Sharifi, M. Akbari. Experimental investigation of the effect of process parameters on cutting region temperature and cutting edge quality in laser cutting of AL6061T6 alloy. *Optik*. 2019. V. 184. P. 457-463.
2. A. Rivero, F. Quintero, J. del Val, M. Boutinguiza, D. Wallerstein, R. Comesana, F. Lusquinos, J. Pou., Laser cutting of aluminium alloy 2024-T3. *Procedia Manufacturing*. 2017. V. 13. P. 396-401.
3. А.Н. Малов, А.М. Оришич, В.Б. Шулятьев. Мощный импульсно-периодический CO_2 -лазер с механической модуляцией добротности и его применение для исследований в аэродинамических установках. *Квантовая электроника*. 2011. Т. 41. №. 11. С. 1027 – 1032.

DOI: 10.17223/9785946218412/399

ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ СВАРКИ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА CoCrFeNiMn-0.9%С

Шайсултанов Д.Г., Степанов Н.Д., Высоцкий И.В., Жеребцов С.В.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород

В последнее время значительное внимание исследователей привлекают многокомпонентные сплавы приблизительно эквивалентных композиций, получившие устойчивое название высокоэнтропийных сплавов (ВЭСов). Согласно оригинальному определению, ВЭСы – это сплавы, которые содержат 5 и более элементов в эквимольных концентрациях с содержанием каждого элемента от 5 до 35 ат.% [1]. Многочисленные исследования продемонстрировали, что ВЭСы могут обладать рядом привлекательных свойств, включающих в себя высокую твердость, износостойкость, коррозионную стойкость, хорошим сочетанием прочности и пластичности при комнатной температуре, высокой прочностью при повышенных температурах [2–10].

На сегодняшний день одним из хорошо изученных сплавов является эквивалентный сплав CoCrFeNiMn, имеющий однофазную структуру твердого раствора с гранцентрированной кубической (ГЦК) решеткой. Сплав демонстрирует высокую пластичность при комнатной температуре и удивительно высокие прочностные и пластические свойства при криогенных температурах – предел текучести и пластичность в 2 раза выше, чем при комнатной температуре [2,3]. Известно, что свойства сплава могут быть улучшены как за счет термомеханической обработки [11], так и за счет дополнительного легирования [11–13] В качестве потенциального легирующего элемента особое внимание привлекает такой элемент внедрения как углерод [11,12], поскольку приводит к значительному упрочнению твердого раствора и может использоваться для изменения механизма деформации из-за сильного влияния на энергию дефекта упаковки ГЦК матрицы [11].

Между тем, высокий уровень механических свойств не является единственной и важной характеристикой для возможного применения любого конструкционного материала. Возможность применения в ВЭСах такого технологического процесса как сварка, также имеет важное значение. Одним из универсальных технологий, имеющих большие перспективы в различных отраслях производства, является сварка трением с перемешиванием (СТП). СТП показала высокую эффективность для создания высококачественных и высокопрочных неразъемных соединений различной геометрии из стали, алюминиевых, медных, титановых и жаропрочных сплавов. Использование такого метода получения сварных соединений из ВЭСов может позволить существенно расширить области их применения. Однако отсутствие информации о влиянии сварки трением с перемешиванием на микроструктуру и механические свойства сварных швов из ВЭСов затрудняет разработку режимов сварки для получения высокопрочных и высококачественных соединений.

В данной работе был использован сплав CoCrFeNiMn–0,9%С (ат.%), полученный методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). В качестве исходного материала использовалась смесь порошков: оксиды из выбранных элементов (NiO, Cr₂O₃, Co₃O₄, Fe₂O₃, MnO₂), чистый углерод (С) и Al, необходимый для воспламенения. Перед сваркой трением с перемешиванием литой сплав подвергался холодной прокатке до 80% и отжигу при 900°С в течение 1 часа для получения однородной, мелкозернистой структуры. Структура сплава после отжига состояла из рекристаллизованной ГЦК-матрицы со средним размером зерна 9,2 мкм и мелких карбидов типа M₂₃C₆ объемной долей 2%. Сварка осуществлялась на воздухе с использованием инструмента на основе WC-Co. Скорость перемещения инструмента соответствовало 100 мм/мин, а частота вращения - 600 об/мин, 800 об/мин и 1000 об/мин. Полученные сварные соединения не имели видимых дефектов. Микроструктура сплава после СТП состояла из относительно равноосных зерен. Установлено, что увеличение частоты оборотов от 600 об/мин до 1000 об/мин приводило к росту среднего

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

размера зерна в зоне перемешивания (ЗП) от $3,2 \pm 0,7$ мкм до $4,6 \pm 2,4$ мкм, соответственно. Во всех состояниях в ЗП, подобно зоне основного материала (ОМ), находились частицы карбидов типа $M_{23}C_6$. При 1000 об/мин объемная доля карбидов составила $\sim 7\%$.

Механические свойства сварных соединений оценивались по результатам измерения микротвёрдости и испытаний на растяжение. Показано, что во всех состояниях ЗП демонстрирует высокую твердость по сравнению с основным материалом. Так, максимальное значение твердости в зоне шва составило 260 HV (600 об/мин), а в основном материале – 180HV. Вероятно, повышение твердости связано с уменьшением размера зерна в зоне сварки в соответствии с механизмом Холла-Петча. Результаты испытаний на растяжение поперечных образцов после СТП показали довольно близкие значения предела прочности с основным материалом ($\sigma_B=683$ МПа - ОМ и $\sigma_B=690-698$ МПа после СТП), но разные значения относительного удлинения - 70% и $\sim 30\%$, соответственно. Максимальные прочностные свойства в продольном направлении наблюдаются при сварке 600 об/мин. Так, $\sigma_{0,2}$ и σ_B равны 644МПа и 790МПа, соответственно, а $\delta = 21\%$. Повышение частоты до 800 об/мин ведет к снижению предела текучести (552 МПа) и предела прочности (756МПа), а также повышению пластичности (30%). При частоте 1000 об/мин пластичность возрастает до 60%, а прочностные свойства снижаются до значений 440МПа ($\sigma_{0,2}$) и 723МПа (σ_B). Изменение прочностных и пластических свойств коррелирует с изменением размера зерен, зависимости от доли частиц карбидов не наблюдается.

1. Yeh J.-W. Recent Progress in High-Entropy Alloys // *Ann. Chim.* 2006. Vol. 31. P. 633–648.
2. Cantor B. et al. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys // *Mater. Sci. Eng. A.* 2004. Vol. 375–377, № 1-2 SPEC. ISS. P. 213–218.
3. Otto F. et al. The influences of temperature and microstructure on the tensile properties of a CoCrFeMnNi high-entropy alloy // *Acta Mater.* 2013. Vol. 61, № 15. P. 5743–5755.
4. Stepanov N.D. et al. Structure and mechanical properties of a light-weight AlNbTiV high entropy alloy // *Mater. Lett. Elsevier*, 2015. Vol. 142. P. 153–155.
5. Senkov O.N. et al. Oxidation behavior of a refractory NbCrMo0.5Ta0.5TiZr alloy // *J. Mater. Sci.* 2012. Vol. 47, № 18. P. 6522–6534.
6. Senkov O.N. et al. Refractory high-entropy alloys // *Intermetallics*. Elsevier Ltd, 2010. Vol. 18, № 9. P. 1758–1765.
7. Senkov O.N. et al. Development of a refractory high entropy superalloy // *Entropy*. 2016. Vol. 18, № 3. P. 1–13.
8. Senkov O.N. et al. Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys // *Intermetallics*. Elsevier Ltd, 2011. Vol. 19, № 5. P. 698–706.
9. Wu Z. et al. Recovery, recrystallization, grain growth and phase stability of a family of FCC-structured multi-component equiatomic solid solution alloys // *Intermetallics*. 2014. Vol. 46. P. 131–140.
10. Wu Y.D. et al. Phase composition and solid solution strengthening effect in TiZrNbMoV high-entropy alloys // *Mater. Des.* 2015. Vol. 83. P. 651–660.
11. Stepanov N.D. et al. Effect of thermomechanical processing on microstructure and mechanical properties of the carbon-containing CoCrFeNiMn high entropy alloy // *J. Alloys Compd.* Elsevier B.V, 2017. Vol. 693. P. 394–405.
12. Stepanov N.D. et al. Effect of carbon content and annealing on structure and hardness of the CoCrFeNiMn-based high entropy alloys // *J. Alloys Compd.* 2016. Vol. 687, № September. P. 59–71.
13. Stepanov N.D. et al. Effect of Al on structure and mechanical properties of Fe-Mn-Cr-Ni-Al non-equiatomic high entropy alloys with high Fe content // *J. Alloys Compd.* Elsevier B.V, 2019. Vol. 770. P. 194–203.

DOI: 10.17223/9785946218412/400

СРАВНЕНИЕ ПРОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛЛА ШВА СО СЛОИСТОЙ СТРУКТУРОЙ, ПОЛУЧЕННОГО СВАРКОЙ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ, С ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ПОСЛОЙНО НАПЛАВЛЕННОГО МЕТАЛЛА

¹Калашникова Т.А., ¹Утяганова В.Р., ¹Калашников К.Н.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

В настоящее время важной задачей для развития сварки трением с перемешиванием (СТП) является изучение формирования слоистой структуры в зоне перемешивания сварного соединения. В работах [1, 2], исследован характер переноса материала инструментом при сварке трением с перемешиванием на примере формирования слоев переноса в результате адгезионного взаимодействия пары «алюминиевый сплав – сталь» при трении скольжения. Такой массоперенос происходит в твердом состоянии и представляется интересным сравнить его характеристики с материалом со слоевой структурой, полученной при аддитивной наплавке. Аддитивное производство изделий из алюминиевых сплавов является одним из новых направлений, однако, уже сейчас можно выделить основные особенности формирования слоистой структуры в жидкой фазе. Граница между последовательно перенесенными слоями при аддитивной наплавке на макроуровне аналогична границе между «луковыми кольцами» при сварке трением с перемешиванием. Ключевой особенностью этих методов является послойное нанесение металла.

Для изготовления изделий электронно-лучевой аддитивной технологией используется металлическая проволока, которая подается специальным устройством. В условиях вакуума проволока попадает под электронный луч, формирующий ванну расплава, и с перемещением стола формирует слой наплавленного материала. Далее, перемещаясь по оси Z, путем нанесения материала слой за слоем формируется изделие. Перенос металла в процессе сварки трением с перемешиванием осуществляется по частям, которые затем последовательно соединяются в зоне перемешивания. Слой пластифицированного металла за счет адгезии материала к инструменту при его движении вперед и одновременном вращении переносится в зону за инструментом, где происходит взаимодействие с ранее перенесенным металлом шва и их соединение.

Для сравнения прочностных характеристик металла шва со слоистой структурой, полученного сваркой трением с перемешиванием, с характеристиками послойно наплавленного металла были получены образцы из алюминиевого сплава АМг5 электронно-лучевой аддитивной технологией и СТП соединения из алюминиевых сплавов 01570 и АМг5. В таких образцах с использованием оптического микроскопа исследовалась микроструктура, были проведены испытания на растяжения.

В результате проведенных работ было выявлено, что, несмотря на схожую слоистую структуру, образованную при сварке трением с перемешиванием и аддитивном производстве, данные процессы различны по структуре и механическим свойствам, полученных образцов.

Процесс сварки трением с перемешиванием сопровождается твердофазным формированием структуры. Слоистая структура зоны перемешивания представлена измельченными зёрнами, формой близкой к равноосной. Прочность соединений, полученных данным методом, составляет 367-385 МПа и 320 МПа для сплавов 01570 и АМг5, соответственно.

В случае жидкофазного массопереноса, образованные слои представлены в основном дендритной структурой. Прочность образцов, полученных аддитивным методом, в 1,5-1,8 раза меньше, чем в образцах полученных сваркой трением с перемешиванием.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Tarasov S. Yu. Adhesion transfer in sliding a steel ball against an aluminum alloy / S. Yu. Tarasov, A. V. Filippov, E. A. Kolubaev, T. A. Kalashnikova // Tribology International. 2017. V. 115. P. 191–198.

2. Tarasov S. Y. A proposed diffusion-controlled wear mechanism of alloy steel friction stir welding (FSW) tools used on an aluminum alloy / S. Y. Tarasov, V. E. Rubtsov, E. A. Kolubaev // Wear. 2014. V. 318. P. 130-134.

DOI: 10.17223/9785946218412/401

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ СПЛАВА «WC - Ni₃Al» ПРИ РЕАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОЙ НАПЛАВКИ ВНЕ ВАКУУМА

¹Крылова Т.А., ¹Чумаков Ю.А., ²Домаров Е.В., ²Корчагин А.И.

¹ *ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН), Томск*

² *ФГБУН Институт ядерной физики Сибирского отделения Российской академии наук (ИЯФ СО РАН), Новосибирск*

Научные коллективы большинства развитых стран мира ведут разработки, направленные на создание новых материалов с целью их применения в авиационной и космической промышленности, автомобильной, станко- и судостроительной отраслях, химическом производстве и ядерной энергетике. Весьма перспективными в этом плане являются интерметаллидные сплавы, среди которых алюминиды никеля, в частности Ni₃Al, вызывают наибольший интерес у исследователей, что обусловлено их повышенной температурой плавления, высокой химической стойкостью низкой плотностью. Для алюминиды Ni₃Al помимо указанных свойств характерна аномальная зависимость предела текучести от температуры нагрева. Однако широкому применению в промышленности препятствует ряд особенностей алюминидов никеля, в первую очередь – низкий уровень пластичности и трещиностойкости. Одним из путей решения данной проблемы может быть получение композиционных покрытий на поверхности интерметаллидных сплавов на основе фаз Ni₃Al для улучшения их свойств, используя принципы экономного легирования тугоплавкими соединениями с применением высокоэнергетического пучка электронов выведенного в атмосферный воздух. Применение высокоэнергетического электронного пучка релятивистских электронов позволит выйти на новый уровень получения композиционных материалов на интерметаллидных сплавов на основе Ni₃Al. Проведен большой цикл работ по поверхностному модифицированию стальных образцов с применением вневакуумной электронно-лучевой наплавки. Так же имеется ряд работ по легированию титановых и алюминиевых сплавов. Исследования влияния электронно-лучевого воздействия вне вакуума на другие материалы рассмотрено в единичных работах. Все проведенные ранее работы по поверхностному модифицированию с применением электронно-лучевой обработки вне вакуума показывают повышение твердости, износостойкости, коррозионной стойкости и ряд других эксплуатационных свойств.

Таким образом в работе проведены исследования возможности получения композиционных покрытий методом электронно-лучевой наплавки вне вакуума порошка карбида вольфрама на подложку интерметаллического соединения Ni₃Al, полученного методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС).

Показано, что наплавка в пучке релятивистских электронов позволяет формировать композиционные покрытия «WC – Ni₃Al», где алюминид никеля является матрицей. Такой тип образующейся структуры приводит к повышению микротвердости в 2-2,5 раза и износостойкости в 1,2-1,6 раз выше по сравнению с материалом подложки - интерметаллического соединения Ni₃Al. Толщина покрытий варьируется от 2 до 2,5 мм. Показано, что выбор флюса является одной из важных задач при реализации наплавки, от которого зависит качество получаемого покрытия, а именно содержание легирующих компонентов в наплавленном слое и защита от окислительного воздействия окружающей среды.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы (Проект № 23.2.2).

Авторы выражают благодарность Голковскому Михаилу Гедалиевичу (Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН) за оказанную помощь в проведении электронно-лучевой наплавки.

DOI: 10.17223/9785946218412/402

MANUFACTURE OF ALUMINUM-STEEL BIMETAL BY FRICTION STIR WELDING

Eliseev A.A., Rubtsov V.E.¹

*Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia
alan@ispms.ru*

A new trend in industry is the use of multi-layered, heterogeneous materials in the design of responsible use. This type of material, called poly- and bimetal, is used in shipbuilding, aerospace, machinery and other industries. Aluminum-steel bimetal are often used in applications requiring high strength, lightness and corrosion resistance at the same time, as well as for welding aluminum and steel through an adapter. Production of such bimetal by traditional fusion welding methods is complicated by the appearance of brittle intermetallics at the interface. A reliable solution can be to produce aluminum-steel bimetal by friction stir welding.

The purpose of this study is to reveal the features of the joint formation of stainless steel 12Cr18Ni10Ti and aluminum alloy 5056 by friction stir welding.

The thickness of AA5056 sheet was 1.5 mm, steel plates 12Cr18Ni10Ti - 5 mm. Friction stir welding was performed on the side of the aluminum sheet overlapping on the steel sheet. For welding the tool from tool high-speed steel T11302-M2 with length of a pin of 1.5 mm was used. Welding was carried out at different technological parameters: rotation rate 800-1000 rpm, axial force on the tool 700-850 kg, feed rate 250-350 mm/min. The weld structure was studied using optical light and scanning electron microscopy.

The geometry of the experiment was organized in such a way that the pin of the tool in the process of welding in order to avoid wear stirred only the material of the AA5056 and did not touch the steel substrate, but at a high force created by the lifting movement of the aluminum material also due to the adhesion forces tightened the material of the steel substrate. This effect is generally called "hooking", since the substrate material to be tightened has a hook shape. It has been established that changes in the technological parameters of friction stir welding affect the size of this hook. In particular, the largest hook was observed at medium parameters, which provided the greatest adhesion. Thus on boundary of layers on all modes there was no formation of brittle intermetallics, and joint represented a mechanical mixture.

From the results of the study it can be concluded that the formation of a bimetallic aluminum-steel joint by friction stir welding does not require contact between the tool and the substrate, and the most influential factor in the quality of the joint is adhesion.

DOI: 10.17223/9785946218412/403

ПРОЦЕСС ДУГОВОГО ПРОТОТИПИРОВАНИЯ С ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫМ ПОДОГРЕВОМ ПРОВОЛОКИ

¹Крампит М.А., ¹Кузнецов М.А., ²Крампит А.Г., ¹Зеленковский А.А..

¹ Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского Томского политехнического университета, Юрга
²АО «НПП «Исток» им. Шокина», Фрязино

Одна из основных проблем при дуговом прототипировании – высокий нагрев изделия, что приводит к снижению точности изготовления готового продукта вследствие изменения геометрических размеров валика, зависящих от температуры заготовки. Происходит увеличение ширины наплавленного валика, а, в случае, формирования тонкостенных изделий – перегрев, стекание стенки и искажение геометрических размеров. Также большой нагрев изделия в целом приводит к его окислению.

Одним из способов решения данной проблемы является применение способа электродугового выращивания с периодическими разрывами дуги и с предварительным подогревом электродной проволоки.

Сущность процесса заключается в нарушении равенства «скорость подачи проволоки – скорость плавления проволоки». На низком энергетическом интервале скорость подачи проволоки немного превышает скорость ее плавления. Длина дуги поддерживается наложением импульсов тока. После формирования капли происходит короткое замыкание и перенос капли. Во время короткого замыкания накладывается большой импульс по току, который разрывает дугу. После этого происходит ее повторное зажигание и процесс повторяется (рисунок 1).

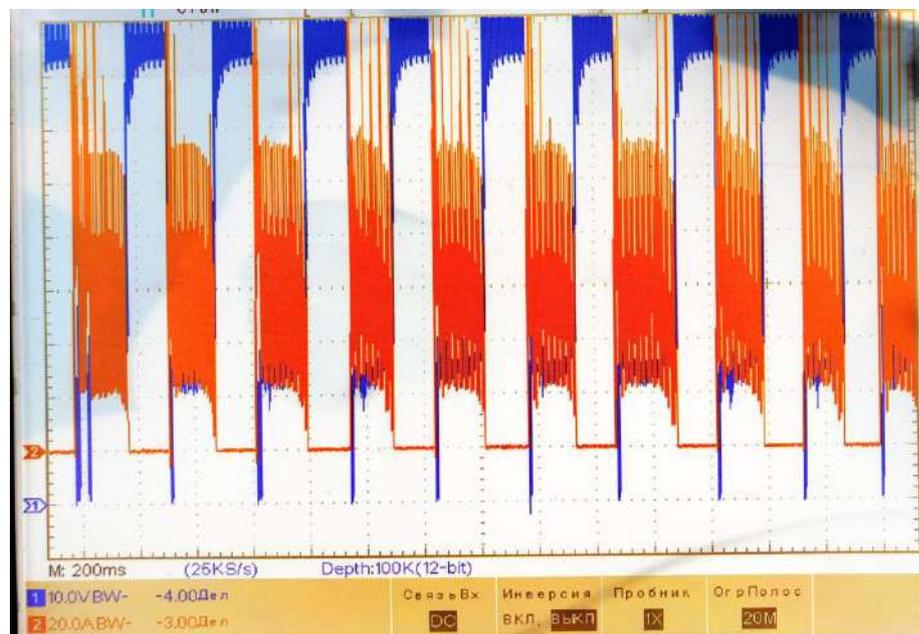


Рис. 1. Оциллограмма процесса

Для того, чтобы повысить объем наплавленного металла и снизить тепловложения в наплаваемый слой происходит подогрев проволоки в диапазоне 350-650 °С. Это позволяет более быстрое формирование и перенос капли на том же токе, что приведет к снижению тепловложения в наплаваемый слой и в выращиваемое изделие в целом.

Процесс электродугового выращивания проходит стабильно, импульс тока во время короткого замыкания облегчает повторное зажигание сварочной дуги. Частота переноса – 2-10 Гц. Наплавленный валик получается усиленный, зона перегрева небольшая и выражена

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

неявно, что приводит к выращиванию изделия с более точными размерами и без искажения их геометрических размеров.

Реализация данного процесса позволит снизить:

- размер зоны термического влияния (ЗТВ);
- внутренние остаточные напряжения в изготовленном изделии;
- тепловложения в наплавляемый слой.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00036.

1. В.В. Жуков, Г.М. Григоренко, В.А. Шаповалов Аддитивное производство металлических изделий (обзор) // Автоматическая сварка.– 2016. – № 5-6. – С. 148-153.
2. В.Н. Коржик, В.Ю. Хаскин, В.И. Ткачук, С.И. Пелешенко, В.В. Коротенко, А.А. Бабич Трехмерная печать металлических объемных изделий сложной формы на основе сварочных плазменно-дуговых технологий // Автоматическая сварка.– 2016. – № 5-6. – С. 127-134.

DOI: 10.17223/9785946218412/404

ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ПОДАЧИ НА КАЧЕСТВО БИМЕТАЛЛА ТИТАН-АЛЮМИНИЙ, ПОЛУЧЕННОГО СВАРКОЙ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ

Ермакова С.А., Елисеев А.А., Рубцов В.Е.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

svetlana.boek@yandex.ru

Актуальной темой для науки и производства на сегодняшний день является получение биметаллических материалов, которые перспективны для использования в аэрокосмической индустрии. Особо остро стоит вопрос получения биметаллов титан-алюминий, поскольку традиционные плавящие способы сварки не позволяют получать качественные сварные соединения. Большое тепловложение приводит к образованию слоя хрупких интерметаллидов, разупрочняющих соединение, и высоких напряжений на границе раздела разнородных слоёв, что вызвано различными термодинамическими свойствами сплавов. Сварка трением с перемешиванием, которая происходит без плавления материала, позволяет успешно сваривать большинство разнородных традиционных конструкционных материалов с удовлетворительным качеством. В случае пары титан-алюминий, достигнут некоторый успех в стыковой сварке и сварке внахлест через алюминий. На границе раздела также образуется слой интерметаллидов, но меньшей толщины, а также соединение представляет собой механическую смесь, которая тем прочнее, чем сильнее развита поверхность раздела. В точки зрения развития поверхности раздела, нахлесточная сварка через титан может быть более успешна, поскольку замешивание алюминия со стороны корня шва может сравнительно проще. Такой способ в настоящий момент почти не исследован.

В данной работе ставится цель исследовать особенности формирования биметалла титан-алюминий сваркой трением с перемешиванием и зависимость поверхности раздела от технологических параметров сварки.

Толщина листового проката АМг5 составляла 2,5 мм, пластины титанового сплава ВТ1-0 – 2,5 мм. Сварка трением с перемешиванием в среде аргона осуществлялась со стороны листа титана, расположенного внахлест на листе алюминия. Для сварки использовался инструмент из жаропрочного сплава ЖС6У с длиной пина 2,8 мм. Сварка проводилась при различных технологических параметрах: частота вращения инструмента 950 об/мин, аксиальная нагрузка на инструмент 800 кг, подача инструмента 100-180 мм/мин. Структура шва исследовалась с применением оптической световой и растровой электронной микроскопии. Для выявления механических свойств полученных соединений проводились механические испытания на растяжение.

Результаты исследований показали, что качество биметалла титан-алюминий в целом обратно пропорционально росту скорости подачи инструмента.

DOI: 10.17223/9785946218412/405

ГИБРИДНАЯ ЛАЗЕРНО-ДУГОВАЯ СВАРКА СТАЛИ 12Х18Н10Т: СТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ МЕТАЛЛА ШВА

Воронцов А.В., Калашникова Т.А., Дмитриев А.В.

Институт физики прочности и материаловедения, Томск

Гибридная лазерно-дуговая сварка имеет различные модификации такие как лазер+MIG/MAG, лазер+TIG и может применяться для различных целей. Сваривание толстостенных, крупногабаритных конструкций в судостроении, авиастроении, нефтегазовой, транспортной промышленности всегда является актуальной задачей. Большая производительность, возможность сваривания толстостенных конструкций, наименьшая требовательность к величине зазора между свариваемыми листами делает гибридную сварку очень перспективной для промышленности. Гибридные процессы позволяют обеспечить лучшую свариваемость и снизить требования подготовки стыков по сравнению с лазерными технологиями, а также повысить производительность и качество сварного шва, уменьшить деформацию изделия по сравнению с дуговыми технологиями.

В этой работе гибридную лазерно-дуговую сварку (ГЛС) проводили на листовом прокате нержавеющей стали 12Х18Н10Т. В качестве заготовок использовались пластины толщиной 12 мм и размером 300×120мм.

В процессе сварки использовали иттербиевый волоконный лазер IPG YLR-15000 с максимальной мощностью 15 кВт, длина волны 1070 nm. В данной постановке эксперимента, лазер имел лидирующее положение относительно дуговой горелки. Расстояние между лезером и дугой составляло 6 мм. Лазерное излучение было направлено нормально к поверхности заготовок. Для эффективного проникновения лазерного излучения к корню шва выдерживался воздушный зазор величиной 0.8 мм. Кромки свариваемых листов не подвергались механической обработке, разделки кромок не осуществлялось. Фокус лазерного излучения находился на лицевой поверхности заготовок. Дуговая горелка была наклонена в противоположную сторону от лазера на $\alpha=50^\circ$. Мощность лазерного излучения при сварке составляла 12 кВт, ток дуги – 210 А, напряжение дуги – 25.7 В, скорость сварки – 2.5 м/мин.

Измерения микротвердости проводили методом Виккерса на микротвердомере Duramin 5 при нагрузке в 50 г. Первая линия измерений микротвердости проходит полностью в зоне воздействия дугового источника. Вторая горизонтальная линия проходит через зону сварочной ванны полученной лазерным источником. Вертикальная траектория измерений микротвердости – от лицевой стороны шва до корня шва. Вертикальная траектория измерений качественно покажет изменения в значениях микротвердости, происходящие с переходом от зоны плавления дуговым источником к зоне плавления лазерным источником.

На рис. 2а приведена структура шва с выделенными основными зонами плавления сварочного процесса. Желтым оттенком отмечена зона плавления дуговым источником, она представляет собой широкую область у лицевой стороны шва. Дендритная структура в данной области представляет собой вытянутые вдоль роста при затвердевании зерна. Оттенком зеленого цвета показана зона плавления лазером. Эта зона представляет собой узкую область переплавленного металла с более мелкими зернами, по сравнению с зоной плавления дуговым источником.

Исследования микротвердости показали особенности формирования металла шва обеих зон плавления (рис. 2б). Максимальное значение в области дуговой сварки находится на уровне 3.05 ГПа. В области плавления дуговым источником при рассмотрении вертикального профиля микротвердости наблюдается вначале понижение значений микротвердости на 0.25 ГПа к центру области переплавленного дугой металла. Приближаясь к зоне плавления лазером, наблюдается постепенное повышение значений микротвердости. Достигая значения 2.95 ГПа, с переходом в зону плавления лазерным источником значения микротвердости имеют небольшой спад до значений 2.90 ГПа.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

На рис. 2б область измерения микротвердости в зоне плавления лазерным источником показана красными точками. В зоне плавления лазерным источником наблюдается пиковое значение микротвердости более 3.10 ГПа. При приближении к корню шва в значениях профиля микротвердости наблюдается качественный спад. Спад значений микротвердости происходит постепенно, это наблюдается на рис. 2б.

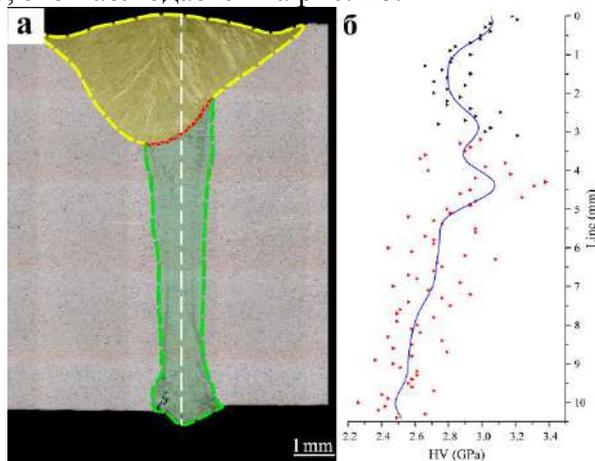


Рис. 2. а – форма сварного шва; б – профиль микротвердости по вертикальной траектории 3

При рассмотрении профиля микротвердости зоны дуговой сварки в поперечном сечении по горизонтальной траектории 1 (рис. 1б) постепенное увеличение микротвердости, достигающее свое пиковое значение в 2.8 ГПа вблизи границы зоны плавления. Далее происходит снижение значения микротвердости к центру области плавления дуговым источником.

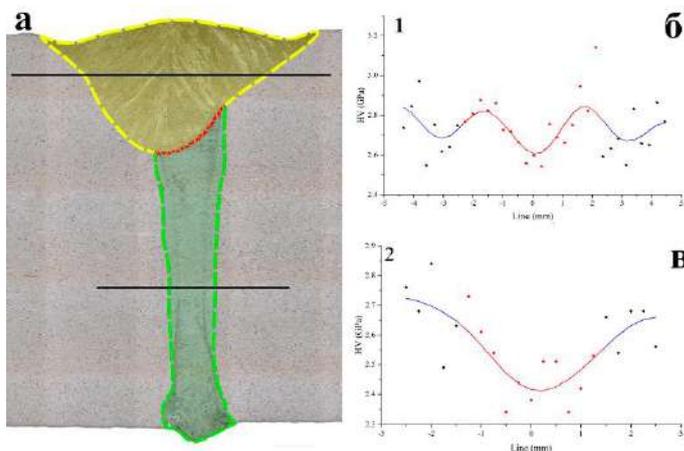


Рис. 3. а – траектории измерения микротвердости зоны плавления дуговым и лазерным источником; б, в – профили микротвердости сварного шва по траекториям 1 и 2, соответственно

Профиль значений микротвердости, измеренный в области лазерной сварки, траектория 2 (рис. 1б), показан также на рис. 3с. Наблюдается снижение микротвердости к центру шва до значений 2,40 ГПа.

Финансирование

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.607.21.0190, идентификатор проекта RFMEFI60717X0190)

DOI: 10.17223/9785946218412/406

СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛА ШВА СТАЛИ 12Х18Н10Т, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ГИБРИДНОЙ ЛАЗЕРНО-ДУГОВОЙ СВАРКИ

Воронцов А.В., Калашникова Т.А., Дмитриев А.В.

Институт физики прочности и материаловедения, Томск

Гибридная лазерно-дуговая сварка является перспективным методом получения сварных соединений. Отличительной особенностью данного процесса является взаимодействие двух источников тепла в одной сварочной ванне расплава. С помощью данного вида сварки возможно сваривание за один проход толстостенных металлических заготовок без разделки кромок с высокой скоростью. Исследования сварных швов на примере нержавеющей стали 12Х18Н10Т являются очень важными в сварочном производстве.

Целью работы является исследование структуры и механических свойств сварного шва нержавеющей стали 12Х18Н10Т, полученного методом гибридной лазерно-дуговой сварки.

Исследования сварных швов гибридной лазерно-дуговой сварки (ГЛС) проводились на листовом прокате нержавеющей стали 12Х18Н10Т. Химический состав используемой стали: Fe, <0.12% С, 17-19% Cr, 9-12% Ni, <2% Mn, <1% Si, 0.3-0.7% Ti, <0.045% P, <0.03% S. В качестве заготовок использовались пластины толщиной 10 мм и размером 300×120мм.

Для получения неразъемных соединений использовался иттербиевый волоконный лазер производства компании IPG с длиной волны 1.07 мкм. При сварке лазерное излучение было направлено перпендикулярно к плоскости заготовок, фокус лазерного излучения находился на плоскости лицевой поверхности сварных заготовок. Для достижения полного проплавления выдерживался воздушный зазор между свариваемыми пластинами, величина которого составляла 0.8 мм.

Сварочная горелка дугового источника находилась позади лазерного источника на расстоянии $D_L=6.0$ мм, что дало возможность разделить две взаимодействующие зоны: сварочную ванну от лазерного источника и сварочную ванну от дугового источника. Сварочная горелка была отклонена на угол $\alpha=50^\circ$. Мощность лазерного излучения при сварке составляла 12 кВт, ток дуги – 210 А, напряжение дуги – 25.7 В, скорость сварки – 2.5 м/мин.

Исследования на статическое растяжение проводились на специально подготовленных образцах меньшего размера, позволяющих испытать металл шва разных зон плавления – дуговой и лазерной.

На рис. 2а приведена макроструктура шва с выделенными основными зонами сварочного процесса. Черным контуром обозначена зона плавления дуговым и лазерным источниками. Структура зон влияния тепловых источников в сварочном процессе под бóльшим увеличением показана на рис. 2б,в. Металл шва, переплавленный посредством лазерного излучения, отличается более измельченной столбчатой структурой, по сравнению со столбчатыми зернами зоны плавления дуговым источником. Это также обусловлено более высокой скоростью охлаждения в зоне 2-3 (рис. 2б,в).

В зоне плавления лазером визуально наблюдаются зоны повышенного травления, обозначенные красным пунктиром на рис. 2б,в. Зона 3, присутствующая на протяжении всей глубины проплавления источником лазерного излучения менее однородна. Мы полагаем, что это происходит из-за повышенных энергозатрат в процессе сварки. При повышенном значении энергии лазерного источника тепло, отражаясь от границы раздела нижней части образца, течет в обратном направлении. Дополнительный нагрев провоцирует неравномерное охлаждение по глубине сварного шва. Образованные границы показывают насколько эффективно свариваемые пластины отводят тепло с зоны плавления.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

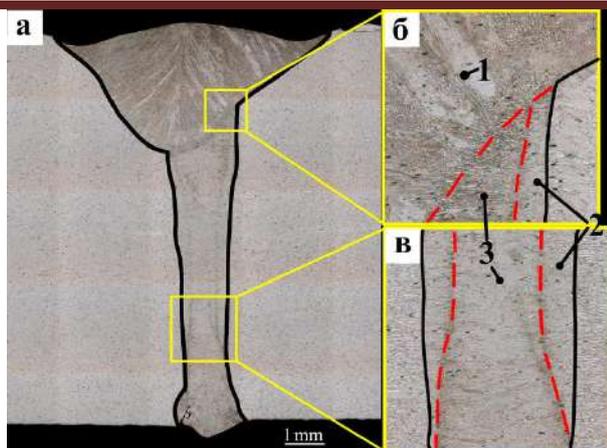


Рис. 2. Структура сварного соединения. а - макроструктура сварного соединения гибридной лазерно-дуговой сварки, б – структура металла шва в месте воздействия дугового и лазерного источника, в – структура металла шва в месте воздействия лазерного источника

Проведен ряд испытаний на статическое растяжение. Ввиду того, что прочность данного сплава в литом состоянии сравнима с прочностью основного металла в состоянии проката, были вырезаны нестандартные образцы, позволяющие оценить механические свойства металла шва в различных зонах.

По результатам испытаний сварного шва на статическое растяжение (табл. 1) можно сделать вывод, что предел прочности металла шва, образцов типа 3, в зоне плавления дуговым источником оказался в среднем выше, чем в зоне плавления лазерным излучением. При этом прочность металла шва при наложении нагрузки вдоль роста дендритов (образцы типа 1, 2), оказалась выше у зоны плавления лазерным источником. Прочность металла шва зоны плавления дуговым источником оказалась наименьшей.

Данные испытаний образцов, вырезанных из области границы между дуговой и лазерной зоной плавления неоднозначны. Значения прочности находятся между значениями прочности зон плавления по отдельности. По полученным данным сложно сказать о прочностных характеристиках этой зоны. Образец под маркировкой «ОМ» – образец для определения предела прочности основного металла.

Таблица 1 Результаты испытаний металла шва разных зон сварки на статическое растяжение.

Образец	Тип образца	Положение разрушения	Среднее значение предела прочности при растяжении, МПа
laser	3, попер	металл шва	742
laser	2, вдоль	металл шва	752
arc+laser	3, попер	металл шва	757
arc+laser	1, вдоль	металл шва	722
arc	3, попер	металл шва	776
arc	1, вдоль	металл шва	667
ОМ	1	основной металл	698

Проведенные испытания на статическое растяжение металла шва дуговой и лазерной зон плавления различны между собой. В зависимости от направления роста дендритов по отношению к напряжению при испытаниях, наблюдается анизотропия металла шва.

Финансирование

Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.607.21.0190, идентификатор проекта RFMEFI60717X0190)

DOI: 10.17223/9785946218412/407

**ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ЗОН ТЕРМИЧЕСКОГО ВЛИЯНИЯ
ЛАЗЕРНОГО СВАРНОГО СОЕДИНЕНИЯ НИЗКОУГЛЕРОДИСТОЙ ФЕРРИТО-
ПЕРЛИТНОЙ СТАЛИ**

¹Деревягина Л.С., ¹Гордиенко А.И., ²Оришич А.М., ²Маликов А.Г., ¹Сурикова Н.С.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск*

Процесс сварки является неотъемлемой частью трубопроводного строительства, активно развиваемого во многих регионах нашей страны. При проведении сварки механические свойства и вязкость разрушения трубных изделий могут существенно снижаться. Это связано с тем, что при высокоскоростном нагреве и быстром охлаждении в зоне сварного шва формируется неоднородная градиентная структура. Она может состоять из целого спектра продуктов промежуточного превращения (гранулярный бейнит, верхний и нижний бейнит, мартенсит, дисперсные частицы вторых фаз и др.). Среди разных способов реализации сварочного процесса использование высококонцентрированных потоков энергии лазерного излучения в настоящее время является перспективным направлением развития технологий получения неразъемных соединений.

Вследствие этого, целью настоящей работы являлось изучение строения и условий формирования микроструктур промежуточного превращения в сварном шве низкоуглеродистой стали 10Г2ФБЮ после лазерной сварки.

Лазерная сварка пластин стали 10Г2ФБЮ размерами 55×55×1.2 мм осуществлялась за один проход на автоматизированном лазерном технологическом комплексе «Сибирь-1», включающем непрерывный CO₂-лазер с мощностью до 8 кВт. Мощность лазерного излучения P составляла 1.2 кВт, скорость сварки V – 1 мм/мин., заглубление фокуса Δf – 2 мм от верхней поверхности листа. Для защиты сварного шва и корня шва использовался инертный газ (гелий). Для пластин со сварным швом был проведен дополнительный отжиг при температуре 550°C в течении 60 мин.

Травление шлифов для металлографических исследований проводили в 3% спиртовом растворе HNO₃. Структурно-фазовое состояние сварного шва исследовали с использованием оптического микроскопа (ОМ) марки Zeiss Axiovert, просвечивающих электронных микроскопов (ЭМ) SM-12 и HT-7700 (Hitachi). Концентрационное распределение элементов в зонах сварного шва определяли методом энергодисперсионного микроанализа на микроскопе LEO EVO 50. С целью локального исследования структур в узких зонах термического влияния (ЗТВ) для вырезки фольг использовали систему фокусируемого ионного пучка FIB (FIB2100).

После лазерной сварки стали получен тонкий сварной шов шириной 2220 мкм. В сварном соединении выделялись зона сплавления (ЗС) и ЗТВ с размерами соответственно 1220 мкм и 1000 мкм. Вследствие высоких скоростей охлаждения в ЗС сформировалась дендритная структура с типичным реечным пакетным мартенситом. Ширина реек мартенсита варьируется от 80 до 700 нм. Между рейками мартенсита и внутри них обнаружены включения цементита в виде тонких прослоек шириной, соответственно, 20-40 нм и 5-10 нм.

В ЗТВ обнаружено два основных участка: полной и частичной перекристаллизации. Подобная классификация использована в работе [1]. Положительным фактором является отсутствие участка крупного зерна, что связано с высокими скоростями охлаждения после лазерной сварки. Участки полной перекристаллизации непосредственно примыкают по обе стороны к ЗС и протяженность их составляет 150-200 мкм. Микроструктура в них имеет переходную структуру верхнего бейнита и мартенсита, рейки которых ограничены границами бывших аустенитных зерен, что свидетельствует о разогреве этой области до температурного интервала существования γ-фазы, т.е. выше критической точки Ac₃.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

Участки полной перекристаллизации занимают основную часть ЗТВ и характеризуются полосчатостью структурных составляющих, светлые ферритные области (рис. 1, а, области А, В) чередуются с более темными (рис.1, а, области С, D). Последние резко переходят в перлитную фазу в зоне основного материала. В ЗТВ в областях D, которые соответствовали бывшим перлитным зернам, обнаружены глобулярный и нижний вырожденный бейнит. Нижний бейнит имеет речную морфологию феррита с участками М/А составляющей на границах реек бейнита (рис. 1, б), присутствие которой подтверждает темнопольное изображение, полученное в рефлексе аустенита (рис.1, в). В структуре присутствовали два типа М/А составляющей в виде тонких реек (slender shape) и блочных участков (blocky-type shape). Толщина тонких реек М/А составляющей находилась в пределах 20-60 нм, а их длина 120-800 нм. Ширина участков М/А составляющей блочной формы – 80-120 нм. Строение М-А составляющей представляет собой чередующиеся пластинки мартенсита и аустенита. В структуре также присутствовали небольшие участки сдвойнированного мартенсита. Ширина дисперсных пластинок в сдвойнированном мартенсите составляла 5-7 нм.

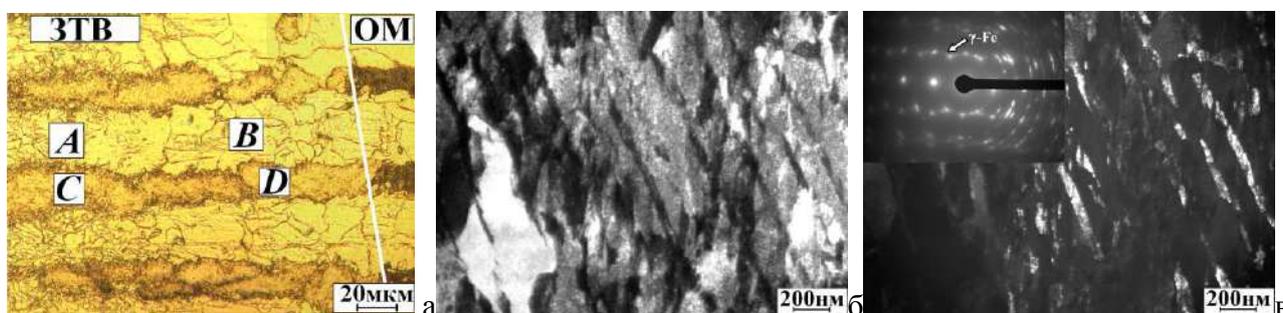


Рис.1. Микроструктуры стали в ЗТВ: ОМ-изображение (а), ЭМ-изображения (б, в): светлопольное изображение в области D (б); соответствующая дифракционная картина и темнопольное изображение в рефлексе γ -Fe (в)

После отжига образцов со сварным швом качественных изменений в ЗС не произошло, дендритная структура сохранилась. Однако локально произошел распад мартенситной структуры. Между рейками мартенсита выделились округлые частицы Fe_3C . Такая структура характерна для отпущенного мартенсита. Более значительные изменения структуры произошли в ЗТВ. На участке частичной перекристаллизации сохраняется полосчатость структурных элементов. Но по сравнению с состоянием до отжига наблюдается увеличение размера ферритных зерен в областях А и В за счет протекания процесса рекристаллизации. При исследовании тонкой структуры областей D в ЗТВ после отжига обнаружено, что речная структура нижнего бейнита сохраняется. Ширина реек находится в интервале 110-250 нм. На дифракционной картине отсутствуют рефлексы аустенита и присутствует множество цементитных рефлексов. В местах, где раньше находились участки М-А составляющей, обнаружено присутствие большого количества частиц Fe_3C в виде удлиненных пластин шириной 20-40 нм и линзовидных частиц шириной 40-60 нм. Таким образом, после отжига М/А составляющая распадается с образованием карбида Fe_3C и структура соответствует сорбиту отпуска.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Иванов А.Ю., Сулягин Р.В., Мотовилина Г.Д., Хлусова Е.И. Структура и свойства зоны термического влияния труб из стали класса прочности X80 при сварке с разной погонной энергией // *Металлург.* 2011. №6. С.58-64.

DOI: 10.17223/9785946218412/408

ВЛИЯНИЕ ФРИКЦИОННОЙ ПЕРЕМЕШИВАЮЩЕЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ НИКЕЛИДА ТИТАНА

Миронов Ю.П., Лотков А.И., Гришков В.Н., Рубцов В.Е., Белобородов В.А.
ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Представлены результаты исследования влияния воздействия, подобного сварке трением с перемешиванием (СТП), на структурно-фазовое состояние пластин толщиной 1.2 мм листового проката сплавов на основе никелида титана двух составов Ti-50.9(ат.%)Ni и Ti-50.2(ат.%)Ni производства МАТЭК-СПФ, Россия. Использование СТП для сплавов на основе никелида титана (TiNi) позволит создавать сложные конструкции из этих материалов [1], а также материалы с градиентной структурой (или составом) [2].

Процесс имитации СТП осуществляли на лабораторном стенде для экспериментальных исследований технологических режимов сварки трением с перемешиванием [3] посредством внедрения специального вращающегося инструмента (рис.1), изготовленного из жаропрочного сплава на никелевой основе ЖС6У в закреплённую пластину никелида титана. Вращающийся инструмент, подаваемый под осевой нагрузкой, в результате фрикционного взаимодействия с пластиной, разогревает её и переводит в состояние, когда может быть сравнительно легко осуществлена пластическая деформация. После погружения инструмента в пластину до уровня заплечиков инструмента, ему придавалось поступательное движение, которое формировало дорожку с модифицированной структурой. Для защиты дорожки от окисления производили подачу инертного газа аргона в зону разогрева. Нами было опробовано несколько технологических режимов СТП в диапазонах: нагрузка на инструмент – 600-1800 кг; частота вращения инструмента – 800-950 об/мин.; линейная скорость перемещения инструмента – 80-150 мм/мин.

Проведен сравнительный анализ структурно-фазового состояния никелида титана вышеуказанных составов: 1) в состоянии поставки; 2) в зоне термического влияния дорожки (ЗТВ); 3) в дорожке СТП непосредственно после её естественного охлаждения; 4) в дорожке после травли поверхностного слоя толщиной 0.05 мм.

Удаление поверхностного слоя дорожки производили её травлением в водном растворе $\text{HNO}_3 + \text{HF}$. Рентгенодифракционный анализ образцов проводили на дифрактометре ДРОН-7 (Буревестник, Россия), с использованием фильтрованного $\text{Co-K}\alpha$ излучения.

В большинстве режимов СТП, за исключением минимальных нагрузок, получены дорожки без дефектов (в частности, без микротрещин). Несмотря на принятые меры, наблюдали окисление поверхностных слоев обработанных сплавов (рис.1). ЗТВ характеризуется лишь слабым пожелтением поверхности, примыкающей к дорожке, т.е. незначительным окислением.

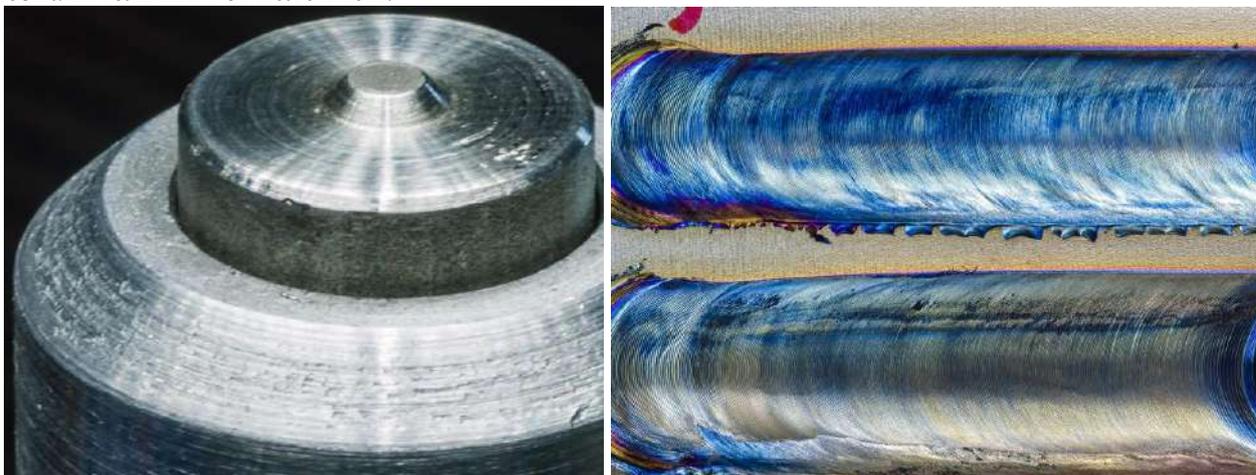


Рис.1. Наконечник инструмента, изготовленный из сплава ЖС6У и две дорожки СТП.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

В состоянии поставки оба сплава имеют широкие дифракционные отражения, затрудняющие идентификацию фаз малого содержания. Сплав с 50.9(ат.%)Ni при комнатной температуре находится в состоянии высокотемпературной фазы B2 (параметр решётки ОЦК $a_{B2} \approx 3.010 \text{ \AA}$), обладающей текстурой прокатки. Разделение вкладов в физическое уширение рефлексов решётки B2 показало как наличие малого среднего размера ОКР – $\langle D \rangle \approx 40 \text{ нм}$, так и высокую величину микродеформации, связанной с напряжениями II-го рода – $\varepsilon^{\text{II}} \approx 0.9\%$. Сплав с 50.2(ат.%)Ni находится в двухфазном состоянии B19'+R (мартенситные фазы с моноклинной и ромбоэдрической структурой, соответственно). Удаление поверхностного слоя исходных образцов травлением не приводит к изменению структурно-фазового состояния обоих сплавов.

В ЗТВ вблизи дорожки, образцы сплава с 50.9(ат.%)Ni сохраняют состояние фазы B2 ($a_{B2} = 3.0116 \pm 0.0003 \text{ \AA}$). Текстура прокатки исчезает. Рентгеновские отражения становятся узкими, т.е. происходит рекристаллизационный отжиг. Это позволяет идентифицировать наличие малого количества фазы типа Ti_2NiO_x , определить низкое значение микродеформации решётки B2 – $\varepsilon^{\text{II}} \approx 0.1\%$ и рост её среднего размера ОКР свыше предельного для метода ($\langle D \rangle \geq 150 \text{ нм}$).

В ЗТВ сплава с 50.2(ат.%)Ni также наблюдается сужение дифракционных отражений. Фиксируется неоднородность фазового состава: можно наблюдать как смесь фаз B2+R+B19', так и подавляющее содержание мартенситной фазы B19'. В обоих случаях на пороге обнаружения наблюдается примесная фаза Ti_2NiO_x .

В приповерхностном слое дорожки образцы сплава с 50.9(ат.%)Ni в основном сохраняют состояние фазы B2 с узкими рефлексами и отсутствием текстуры ($a_{B2} = 3.011 \div 3.013 \text{ \AA}$, с наличием зависимости от кристаллографического направления). В большей степени в это же состояние переходят и образцы сплава с 50.2(ат.%)Ni ($a_{B2} = 3.0114 \pm 0.0005 \text{ \AA}$). При этом сохраняется небольшое количество мартенситной фазы B19'. Кроме того, в дорожках СТП образцов обоих сплавов наблюдается текстурированный поверхностный слой TiO_2 , со структурой рутила, а также увеличение содержания фазы Ti_2NiO_x .

После удаления травлением поверхностного слоя дорожки толщиной 0.05 мм, в ней не обнаружено макроскопических дефектов или включений. В образцах сплава с 50.9(ат.%)Ni наблюдается фаза B2, а в образцах сплава с 50.2(ат.%)Ni – двухфазное состояние B19'+B2. В обоих образцах фиксируется малая объемная доля фазы типа Ti_2NiO_x и отсутствие TiO_2 .

Таким образом, обработка никелида титана, моделирующая процесс СТП, показывает возможность применения данного метода при выбранных типе инструмента и режимах. Подобная обработка приводит к исчезновению текстуры, характерной для исходных образцов, и слабо влияет на структурно-фазовое состояние сплавов. Фазовый состав внутренних объёмов материала дорожки в сплаве с 50.9(ат.%)Ni сохраняет состояние фазы B2, а в сплаве с 50.2(ат.%)Ni, R фаза испытывает превращение в состояние B2. Применённый защитный обдув образцов аргоном при СТП не предохраняет поверхностный слой от окисления. В то же время, толщина окисленного слоя составила менее 0.05 мм.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

1. Mani Prabu S.S., Madhu H.C., Perugu C.S., Akash K. et al. Mater. Sci. Eng. A (2017), 693, 233-236. <http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2017.03.101>.
2. Huang G.Q., Yan Y.F., Wu J., Shen Y.F., Gerlich A.P. J. Alloys Compd. (2019), 786, 257-271. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.01.364>.
3. Kalashnikov K.N., Tarasov S.Y., Chumaevskii A.V. et al. Int J Adv Manuf Technol (2019). <https://doi.org/10.1007/s00170-019-03631-3>.

DOI: 10.17223/9785946218412/409

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ НЕРАЗЪЕМНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СТАЛИ 09Г2С, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ГИБРИДНОЙ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКИ

Гурьянов Д.А., Воронцов А.В., Чумаевский А.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Гибридная лазерная сварка различных сплавов и сталей является на настоящее время перспективным методом получения неразъемных соединений в промышленности. Данная технология основана на синергетическом эффекте от совместного использования лазерного луча и сварочной дуги, позволяющего проводить сварку с высокой производительностью листового проката, в том числе – больших толщин, что затруднительно в случае использования только источника лазерного луча, без дополнительного нагрева от электрической дуги. В ранее проведенных работах коллектива был произведен подбор параметров процесса гибридной лазерной сварки алюминиевых сплавов и сталей, в том числе с ультразвуковым воздействием. В работах производились металлографические исследования структуры сварных швов, исследования прочностных параметров при растяжении и изгибе, измерения микротвердости, распределения химических элементов и др. Проведенные исследования показывают, что сварные соединения, получаемые из алюминиевого сплава АМг5, аустенитной стали 12Х18Н10Т и феррито-перлитной стали 09Г2С формируются методом гибридной лазерной сварки с небольшим количеством дефектов, в основном, в виде пор и имеют достаточно высокие прочностные показатели. Но, в цикле работ, посвященном данным материалам, не исследованы усталостные характеристики неразъемных соединений, полученных методом гибридной лазерной сварки, хотя в ряде конструкций, работающих в условиях постоянных или циклически повторяющихся вибраций данный вид деформации и разрушения может быть основным. Настоящая работа посвящена исследованию деформационного поведения стали 09Г2С при испытаниях в условиях малоциклового усталости.

Исследования неразъемных соединений листового проката стали 09Г2С толщиной от 2,5 до 5,0 мм, полученных методом гибридной лазерной сварки проводили на универсальной испытательной машине BISS UT-04-0100 при частоте от 10 до 80 Гц в интервале нагрузок от 0,3 до 0,7-0,9 от предела прочности. Испытания проводили таким образом, чтобы в различных режимах проявлялись как упругие, так и пластические свойства материала шва. На каждый режим испытания изготавливалось и испытывалось не менее трех образцов сварного шва. Количество режимов испытания подбиралось не менее четырёх, но достаточное для выявления точки или области упругопластического перехода на диаграмме. Испытания проводили до разрушения образцов с фиксацией количества циклов до разрушения и последующим анализом поверхности разрушения на растровом электронном микроскопе Zeiss LEO EVO 50 в режиме вторичных электронов.

Проведенные исследования показывают, что в режиме упруго-пластического деформирования с максимальным напряжением в цикле до 0,9 от предела прочности материала образцы демонстрируют наименьшее количество циклов до разрушения (менее 40 тысяч циклов) и, что более важно, локализацию деформации и разрушения в области за пределами сварного шва, что соответствует локализации деформации при испытаниях на статическое растяжение. В испытаниях при режиме с меньшей долей пластических деформаций с максимальным напряжением в цикле до 0,7 от предела прочности разрушение происходит в центральной части сварного шва. Количество циклов при этом максимально и доходит до 100 тысяч циклов и более. Аналогичная ситуация наблюдается и при анализе влияния частоты циклирования на процесс разрушения - большая частота циклирования увеличивает склонность материала к разрушению по сварному шву, меньшая - в зоне около шва. Таким образом, наличие дефектов в сварном шве стали 09Г2С, полученном методом гибридной лазерной сварки, в большей степени влияет на процесс разрушения при большем количестве циклов и меньшей амплитуде напряжений и деформации, чем при деформации в условиях большей амплитуды и меньшего количества циклов до разрушения.

Работы выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.607.21.0190, идентификатор проекта RFMEFI60717X0190).

DOI: 10.17223/9785946218412/410

ВЗАИМОПРОНИКНОВЕНИЕ ВЕЩЕСТВА, КАК ФАКТОР УВЕЛИЧЕНИЯ СЦЕПЛЕНИЯ БЕТОНОВ В СБОРНО-МОНОЛИТНЫХ КОНСТРУКЦИЯХ

Иванов Д.А., Молодин В.В.

Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск

Надёжность и прочность сборно-монолитных конструкций, в которых после замоноличивания сборные и монолитные части работают совместно, в большей мере обеспечиваются качественным соединением в узлах. Вопрос сцепления зрелого бетона и бетона, уложенного и твердеющего позже, в таких конструкциях становится весьма актуальным.

Бетон является капиллярно-пористым телом. Капилляры пронизывают его тело, обеспечивая паро- и водопроницаемость. При укладке бетонной смеси в сборно-монолитную конструкцию, жидкость затворения проникает в поры и капилляры зрелого бетона (массоперенос) и влияет на сцепление [1, 2, 3].

Исследования автора, позволившие исследовать глубину проникновения жидкости затворения вглубь бетона методом кондуктометрии, показали, что в зависимости от величины температурного градиента она может достигать у обычных бетонов 60-80 мм. Выполненные ранее исследования дают основание полагать, что миграционный поток влаги увлекает с собой частицы цемента и продукты его гидратации, что ведет к увеличению силы сцепления [2, 5, 8]. Очевидно, что продукты гидролиза и гидратации цементного клинкера, проникая в поры и капилляры зрелого бетона и вступая в химические реакции друг с другом, превращаются там в новообразования, формирующие цементный камень. Изучению этого явления посвящено настоящее исследование.

Процесс структурообразования в портландцементе протекает с наличием двух взаимодействующих структур – гидросульфатоалюминатной и гидросиликатной. Основную роль при твердении играют силикаты кальция, которые образуют при гидратации гидросиликаты и гидроксид кальция $\text{Ca}(\text{OH})_2$. В этот период количество продуктов гидратации, в том числе гидросульфатоалюмината кальция – этtringита и гексагональных кристаллов $\text{Ca}(\text{OH})_2$ невелико. Затем наблюдается резкий рост пластической прочности с усиленным образованием кристаллов и этtringита и гидросиликатов кальция [4].

Таким образом, в процессе растворения клинкера и последующего структурообразования цементного камня, в первые 6-12 часов, после растворения, наблюдается большое количество пластинчатых кристаллов гидроксида кальция $\text{Ca}(\text{OH})_2$ [4, 5, 6]. Но, к концу стандартного твердения его количество сводится к минимуму, то есть в зрелом бетоне он практически отсутствует. Следовательно, гидроксид кальция может служить маркером наличия новообразований цементного камня в теле зрелого бетона.

Для исследования из бетона класса В20 изготавливались бетонные образцы размером $150 \times 150 \times 150$ мм, которые выдерживались в нормальных условиях твердения 60 суток. Перед испытанием образцы из зрелого бетона зажимались в форму, где занимали её половину и замораживались в холодильной камере. Во вторую половину, после охлаждения модели, укладывалась бетонная смесь того же состава, что и зрелый бетон, которая подвергалась форсированной термообработке при температуре 80°C , для создания температурного градиента в $1000-1500^\circ\text{C}/\text{м}$. С целью создания одномерного температурного поля модель тщательно утеплялась, за исключением торцов. Через 1 час после начала термообработки модель раскалывалась перпендикулярно шву. Из центральной части образца брались пробы цементного камня из зрелого бетона и из только что схватившейся смеси. Образцы немедленно отправлялись на рентгеноструктурный анализ [7].

Результаты анализа проб, показали, что в свежей смеси (точки 1 и 2), а также в зрелом бетоне 60-суточного возраста, в зонах, куда не проникла влага (точка б), наличие гидроксида кальция не обнаружено. В увлажненных зонах зарегистрировано появление кристаллов

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

$\text{Ca}(\text{OH})_2$. При этом содержание ее кристаллической фазы, судя по величине пиков меняется, от меньшего в зоне контакта к большему в глубине образца.

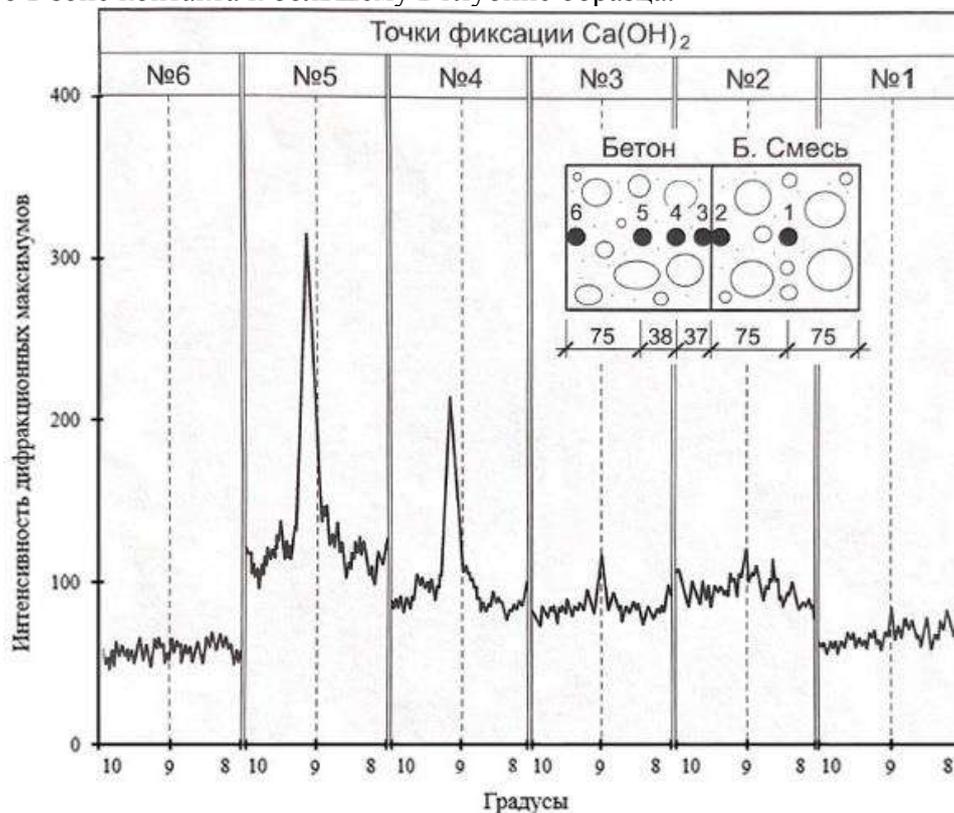


Рис. 1. Рентгенограмма цементного камня и свежей смеси по сечению стыка «зрелый бетон – свежий бетон» через 0,5 часа после термообработки

Полученные данные хорошо объясняют и дополняют картину массообмена в стыке, подвергающемся термообработке. Через 0,5 часа после термообработки в свежем бетоне образование кристаллов гидроксида кальция еще не началось. В зрелом бетоне, не подвергавшемся увлажнению, ее содержание мало и отклика на рентгенограмме практически не дает. Просочившееся в бетон цементное молоко увлажняет его в разной степени. В зависимости от влажности, кристаллизация $\text{Ca}(\text{OH})_2$, просочившейся с жидкостью затворения, началась и дала отклик. В зонах, где увлажнение слабо (точка 5) кристаллизация идет давно, и кристаллов образовалось больше, чем в зонах, где влажность выше. По высоте пиков рентгенограммы можно установить, что элементы цемента, растворенные в воде, за время термообработки проникают вглубь зрелого бетона аналогично влаге, определённой автором ранее методами кондуктометрии, на глубину до 75 мм. Однако, главным образом, она сосредотачиваются в приконтактной зоне, в 20-30 мм от поверхности.

1. Feret R. Resistances des betons a cohérence et décollement comparées a la compression, a la flexion, a la traction. Paris 1930.
2. Утенков В.Ф., Власова М.А. Заделка стыков сборных железобетонных конструкций в зимних условиях. Москва, 1958.
3. Ле Тхой Зыонг, Глаголев А.В. Факторы, влияющие на сцепление старого и нового бетона // Точная наука, 2017. №7. С. 35-38.
4. Мчедлов-Петросян О.П. Химия неорганических строительных материалов. Москва, 1971.
5. Тейлор Хел, Химия цемента. Москва, 1996.
6. Суворова А.А., Пришлецова Т.Д., Сычева Г.Н., Соболев Р.П. Химия неорганических вяжущих материалов. Москва, 2007.
7. Китайгородский А.И. Рентгеноструктурный анализ. Москва, 1950.

DOI: 10.17223/9785946218412/411

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ НЕЛИНЕЙНОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧ ЗИМНЕГО БЕТОНИРОВАНИЯ

Молодин В.В., Чиркунов Ю.А., Лазарев А.А.

Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин)

Уже первые опыты производства бетонных работ в условиях отрицательных температур потребовали ответа на основной вопрос зимнего бетонирования – как рассчитать остывание конструкции забетонированной на морозе и какую прочность при-обретёт бетон за это время.

Сегодня, температурные режимы бетона, подвергающегося термообработке, определяются либо приблизительно [1], либо точными, но очень сложными решениями [2].

Задачей настоящего исследовательского проекта является получение практического подтверждения теории, основанной на принципиально новом, простом решении уравнения интегрального теплового баланса Фурье (1).

$$\bar{Q} = -\lambda \cdot grad(T) \cdot S \tag{1}$$

методами группового анализа дифференциальных уравнений для реальных конструкций неидеальной формы, предложенных заведующим кафедрой высшей математики НГАСУ, доктором физико-математических наук, профессором Ю.А. Чиркуновым [3].

Исследование актуально и направлено на облегчение расчетов тепловых режимов и прочности твердеющего бетона в реальных производственных условиях бетонирования в зимних условиях.

Для подтверждения гипотезы выбрана одна из предложенных функций (2), описывающая процесс распространения тепла в неоднородном стержне при наличии внешнего нестационарного источника тепла:

$$T = \left[\frac{\beta}{(\alpha - 2)(2 - \alpha + \beta)} \right]^{\frac{1}{\beta}} \cdot x^{\frac{2-\alpha}{\beta}} \cdot [(\ln(\varepsilon(t)))']^{\frac{1}{\beta}} \tag{2}$$

В ходе исследования устанавливалась зависимость между:

T – температурой прогрева, t – временем прогрева и x – текущей координатой внутри стержня.

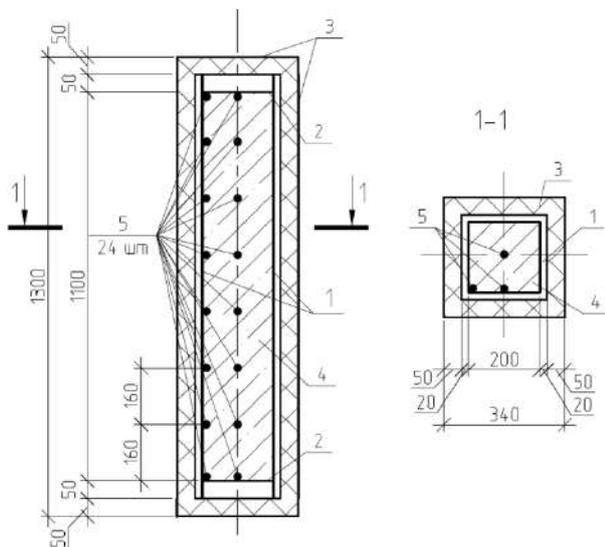


Рис. 1. Экспериментальная модель

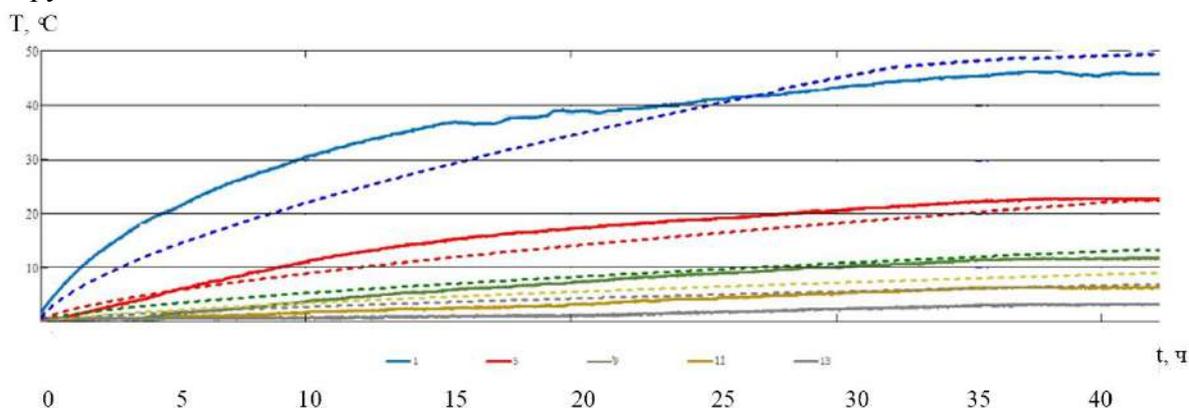
В рамках эксперимента ставилась задача определить тепловую волну в неоднородном стержне и подтвердить или опровергнуть теоретические положения на которых строится новая модель расчёта. С целью приближения процесса к реальному бетонированию, было принято решение заменить стержень моделью колонны.

Экспериментальная модель (см. рис. 1) представляет собой опалубку (1); два нагревательных прибора (2), расположенных у верхнего и нижнего торца колонны; утеплитель боковых граней из плит пенополистирола (3); модельного тела (смесь бентонитовой глины, песка, воды и крупного заполнителя, имитирующая бетонную смесь) (4); термодатчиков (5), установленных вдоль

продольной оси модельного тела с шагом 160 мм по боковой поверхности и в центре.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

В результате обработки данных, считанных с термодатчиков в ходе эксперимента получены следующие графики зависимости температуры от времени. На рисунке (см. рис. 2) представлен характер распределения фактических температур в экспериментальной конструкции для случая, когда нагреватели установлены сверху конструкции. Пунктирной линией на экспериментальном графике показана расчётные кривые изменения температуры в конструкции



Заключение

На основе графиков, построенных по экспериментальным данным и графикам, полученных путем построения зависимостей, предложенных Ю.А. Чиркуновым, можно сделать следующие выводы:

- 1) Сравнение теоретической и экспериментальной кривых изменения температуры для одной точки в конструкции, подвергающейся термообработке, показывает их хорошую сходимость.
- 2) Графики изменения температуры по времени для разных точек конструкции имеют схожий характер и описываются предложенной зависимостью;
- 3) Представляется возможным найти некие коэффициенты, при которых график теоретический будет полностью идентичен результатам эксперимента, что существенно упростит его практическое использование;
- 4) Чтобы снизить погрешность, имеет смысл построить трёхмерный график зависимости $T(t,x)$, где x – расстояние до исследуемой точки;
- 5) Представляется разумным, провести дополнительные исследования с целью анализа тепловой волны, исходящих от нагревающих элементов, находящимися в других плоскостях конструкции (в том числе и на боковых гранях), для усовершенствования технологии прогнозирования режимов термообработки бетонных конструкций.

1. Руководство по производству бетонных работ в зимних условиях в районах Дальнего Востока, Сибири и Крайнего Севера / ЦНИИОМТП Госстроя СССР. – М. : Стройиздат, 1982. – 213 с.
2. Молодин В. В. Бетонирование монолитных строительных конструкций в зимних условиях: монография / В. В. Молодин, Ю. В. Лунев. – Новосибирск : НГАСУ (Сибстрин), 2006. – 300 с.
3. Чиркунов Ю.А. Нелинейное распространение тепла в неоднородном стержне при воздействии нестационарного источника тепла применительно к задачам зимнего бетонирования. // Известия ВУЗов. Строительство. 2018. № 2. С. 70–76.

DOI: 10.17223/9785946218412/412

ОДНОСТАДИЙНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ПОЛИСТИРОЛБЕТОННЫХ ИЗДЕЛИЙ

¹Васенков Е.В., ²Молодин В.В.

¹Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск

²Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск

Исследования свойств полистиролбетона ведутся более 40 лет. Результаты исследований советских и российских ученых приведены в научных работах и публикациях В.А. Рахманова и В.Г. Довжика [1-3], Т.И.Милых [4], А.И.Козловского [5] и др. Результаты исследований европейских ученых представлены в научных статьях Ж.И.Драгицы [6], Ш.Веньбо [7] и др.

Актуальной проблемой применения полистиролбетона является неравномерность распределения гранул заполнителя – полистирола вспененного гранулированного. Фактическая плотность зерен заполнителя с учетом насыщения водой и растворной частью, заметно отличается от средней плотности окружающей растворной части. Как следствие, смесь склонна к расслоению из-за всплытия крупного заполнителя. Один из вариантов решения этой задачи – применения компонентов смеси одного порядка по плотности. Таким материалом является бисерный полистирол. Его насыпная плотность составляет 1050 кг/м³. Вспененный полистирол марок ПСВ и ПСВ-С получают путем одно/многостадийного вспенивания при температурах 90-100°С [8]. Для достижения таких t° может использоваться технология электроразогрева смеси.

Проведенные теоретические исследования позволили выдвинуть рабочую гипотезу: форсированный электроразогрев уложенной в опалубку полистиролбетонной смеси, содержащей полистирольные гранулы, позволяет вспенить гранулы заполнителя в момент потери подвижности цементно-песчаного раствора. Вспенивающиеся гранулы полистирола равномерно распределяются по объему и уплотняют цементно-песчаную смесь при их расширении под действием высоких температур. Это позволяет достичь улучшенных показателей однородности.

В лаборатории кафедры технологии и организации строительства НГАСУ (Сибстрин) были проведены серии пробных испытаний предложенной и традиционной технологий. С этой целью были спроектированы и изготовлены две формы для изготовления полистиролбетонных блоков по одностадийной и традиционной технологиям.

Для определения однородности проводились послойные измерения теплопроводности готовых образцов при помощи прибора для измерения теплопроводности ПИТ-2. Результаты измерения теплопроводности образцов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Послойная теплопроводность образцов полистиролбетона различной плотности.

Образец, технология, плотность	Теплопроводность (Вт/(м·К))				Расслоение, %
	1 слой	2 слой	3 слой	4 слой	
Образец 1, одностадийная, 1200 кг/м ³	0,2107	0,2061	0,2044	0,2033	3,51
Образец 2, одностадийная, 700 кг/м ³	0,1483	0,1474	0,1468	0,1461	1,48
Образец 3, традиционная, 1200 кг/м ³	0,2192	0,2156	0,2112	0,1968	10,23
Образец 4, традиционная, 700 кг/м ³	0,1516	0,1481	0,1457	0,1414	6,73

Для определения прочностных свойств одностадийного полистиролбетона, были произведены испытания для определения кубиковой прочности одностадийных и традиционных образцов. Результаты испытаний представлены в таблице 2.

Таблица 2. Набор прочности полистиролбетоном.

Вид твердения, плотность	3 суток, R, МПа	7 суток, R, МПа	14 суток, R, МПа	28 суток, R, МПа
Электроразогрев, 1200кг/м ³	3,83	7,71	9,38	11,53
Электроразогрев, 700 кг/м ³	2,72	4,75	5,47	6,39
Естественное твердение, 1200 кг/м ³	3,21	5,53	7,10	9,89
Естественное твердение, 700 кг/м ³	1,77	2,44	3,38	5,35

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

Поскольку фазовый состав цементного камня существенно влияет на прочность полистиролбетона, он был исследован и определены основные компоненты. Фазовый состав определяли с помощью рентгеновского дифрактометра.

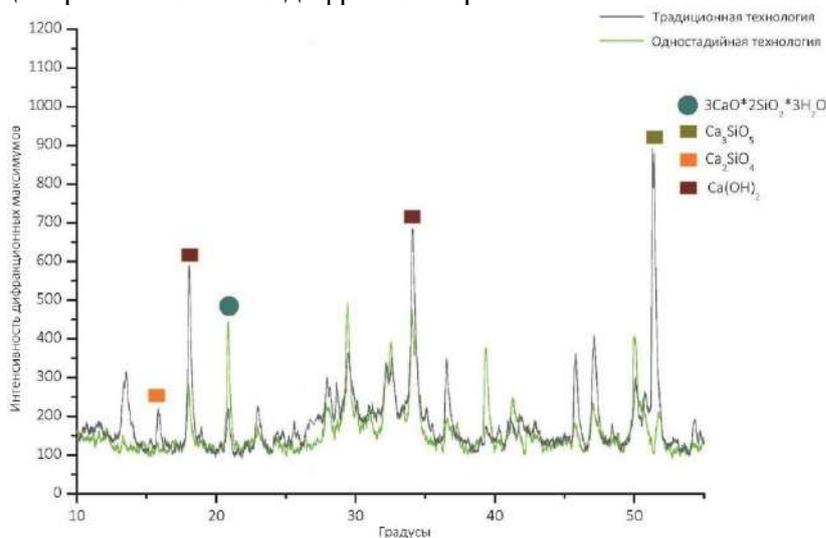


Рис. 1 Рентгенограмма цементного камня 2 образцов.

Поисковыми исследованиями, проведёнными с целью определения целесообразности использования одностадийной технологии получения качественного полистиролбетона:

1. Подтверждено положительное влияние одностадийной технологии на однородность готовых изделий. По сравнению в традиционной технологией показатель однородности вырос более чем в 4 раза для образцов средней плотности 700 кг/м^3 .

2. Выявлено положительное влияние электроразогрева смеси на прочность готовых изделий. Увеличение прочности для образцов средней плотности 700 кг/м^3 составило 16,28%.

3. Выявлено ускоренное образование продуктов твердения цементного камня при термической обработке полистиролбетона.

4. Определены оптимальные режимы и рациональные методы разогрева смеси средней плотности 1200 кг/м^3 и 700 кг/м^3 .

1. Довжик В.Г. Факторы, влияющие на прочность и плотность полистиролбетона // Бетон и железобетон. 2004. № 3. С. 5-11.

2. Довжик В. Г., Рахманов В. А. Амханский Г. Я. Улучшение свойств и оптимизация составов полистиролбетона // П-я Всероссийская (Международная) конференция по бетону и железобетону, «Бетон и железобетон - пути развития». 2005. С. 35-47.

3. Довжик В.Г., Россовский В.Н., Савельева Г.С., Иванова Ю.В. Хаймов И.С., Семенова Т.Д., Сафонов А.А. Технология и свойства полистиролбетона для стеновых конструкций // Бетон и железобетон. 1997. № 2. С. 5-9.

4. Милых Т.И. Конструкционно-теплоизоляционный полистиролбетон // Бетон и железобетон. – 1988. № 10. С. 11-13.

5. Рахманов В.А. Козловский А.И. Варламова А.В. Об экологической безопасности применения полистиролбетона в строительстве // Бетон и железобетон. 1997. № 2. С. 18-20.

6. Драгица Ж.И. Свойства цементной композиции, содержащей гранулы пенополистирола и полипропиленовое волокно. // Химическая инд. 2000. № 11. С. 501-504.

7. Вэньбо Ш. Демпфирующие свойства легкого пенополистиролбетона при динамическом циклическом нагружении // Журнал юго-восточного университета. 2016. №16. С. 179-183.

8. Мелихов В.И., Козловский А.И., Россовский В.Н. Возможности получения особо легкого пенополистирольного заполнителя // Бетон и железобетон. 1997. №2. С. 17-18.

DOI: 10.17223/9785946218412/413

**УПРАВЛЕНИЕ СТРУКТУРОЙ И СВОЙСТВАМИ НАПЛАВЛЕННЫХ ПОКРЫТИЙ
МОДИФИЦИРОВАНИЕМ МЕЛКОРАЗМЕРНЫМИ КОМПОЗИЦИОННЫМИ
ПОРОШКАМИ РАСПЛАВА В РЕЖИМЕ НИЗКОЧАСТОТНОЙ МОДУЛЯЦИИ ТОКА***

Сараев Ю.Н., Безбородов В.П., Перовская М.В., Семенчук В.М.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

litsin@ispms.tsc.ru

Наплавка является экономичным и широко применяемым в промышленности методом восстановления деталей машин и механизмов, придания их рабочей поверхности износостойкости. Наиболее распространённые износостойкие наплавочные материалы включают сплавы с хромом, вольфрамом, бором, молибденом и т.д. Такие материалы: Fe-C-Cr; Fe-C-Mn; Fe-C-W; Fe-C-Cr-Mn; Fe-C-Cr-B; Fe-C-Cr-Ni; Fe-C-Mo; Fe-C-Cr-Mo; Fe-C-Cr-W; Fe-C-Cr-W-V; Fe-C-Cr-W-B и т.д. Для защиты от абразивного износа широко применяются сплавы с высоким содержанием карбидной фазы. Износостойкость этих наплавочных материалов сильно зависит от типа и количества карбидной фазы в сплавах. Чаще всего, упрочняющие фазы в таких наплавочных сплавах содержат карбиды, бориды и нитриды Fe, Cr; W; V, Ti, Mn, Mo и т.д., а также карбобориды и карбонитриды этих элементов. Процесс наплавки из-за различий величин вложений тепла и свойств электродных материалов оказывает специфическое влияние на свойства покрытий.

Свойства наплавленного металла снижаются из-за различных дефектов, которые возникают в процессе наплавки вследствие отклонений и действия остаточных и эксплуатационных напряжений. Эти факторы часто приводят к ускорению разрушению покрытий.

Современные способы наплавки позволяют регламентировать скорость охлаждения материала покрытий и управлять процессами их плавления и кристаллизации, формированием структуры и физико-механическими свойствами.

Важной задачей является исследование влияния технологических режимов наплавки на механические и эксплуатационные характеристики покрытий применением новых присадочных материалов, модифицируемых расплав, и импульсных процессов снижающих вложения тепла и структурную неоднородность металла.

В настоящее время уже почти исчерпаны все возможности увеличения прочности и износостойкости наплавленного металла. Дополнительные возможности появляются при создании новых композиционных порошков. Это позволяет получать композиции без существенных ограничений по составу и числу компонентов.

Целью данной работы являлось: Повышение свойств наплавленных покрытий применением импульсно-дуговых методов наплавки при модифицировании расплавляемого металла композиционными порошковыми материалами с микрокристаллической структурой.

Были проведены исследования наплавленных слоев, полученных наплавкой электродами Т590 на постоянном токе и на импульсном режиме. В работе были исследованы образцы из стали 09Г2С. Наплавка осуществлялась от источника питания ФЕБ-315 «МАГМА» с пультом «Пульс» для реализации импульсно-дугового процесса с модуляцией тока - на частотах 1-5 Гц. Смесь гранул порошков со связующим жидким стеклом наносили тонким слоем на покрытия электродов.

Изменение параметров процесса наплавки влияет на уровень легирования наплавленного металла.

В качестве модифицирующей смеси использовались порошковые модификаторы на основе дисперсных частиц карбидов, боридов и нитридов. Варьирование составов электродного материала позволяет изменять состав наплавленного металла, обладающего различными свойствами после наплавки. При наплавке на постоянном токе формируется крупнодендритная структура наплавленного металла покрытия, а при использовании импульсного режима - мелкодендритная структура (рисунок 1).

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

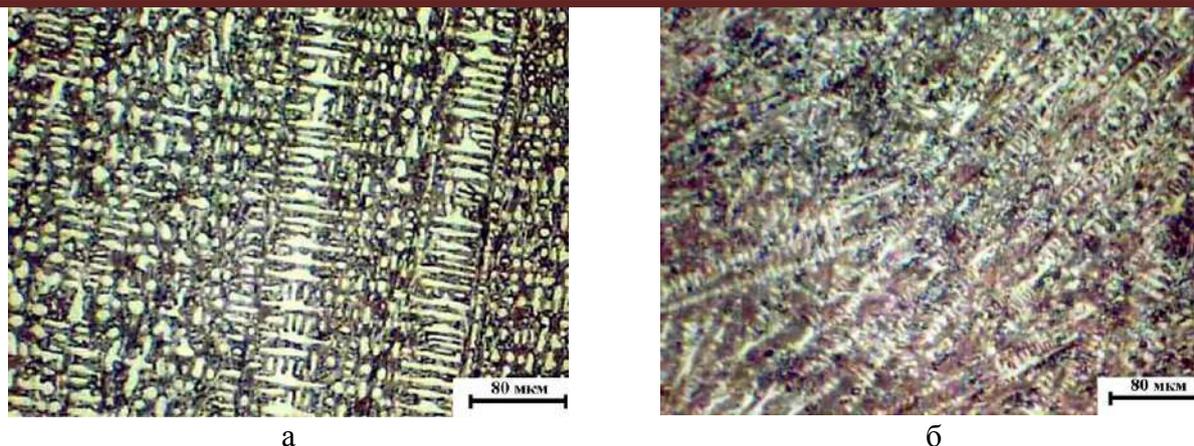


Рисунок 1. Микроструктура наплавленного слоя покрытия, полученного электродами Т590 после наплавки: а) на постоянном токе, б) импульсно-дуговой.

Материал наплавленного покрытия имеет твердость 270-300 НV, ЗТВ 210-230 НV. При постоянном токе температура нагрева выше, что вызывает больший рост зерна. Температура в зоне действия источника тепла в процессе наплавки может превышать температуру плавления тугоплавких соединений. Это приводит к их растворению в расплаве ванны. При наплавке на постоянном токе зона с укрупненным размером зерна шире, чем при модуляции тока, что свидетельствует о более высоких вложениях тепла и длительности термическом воздействии горячей дуги.

Измельчение зерна является одним из способов повышения прочности покрытий. Металлографические исследования наплавленных покрытий выявили измельчение структурных составляющих материала после импульсной технологии в ~ 1,5 раза. Это объясняется особенностями импульсного режима наплавки с интенсивным перемешиванием расплава и образованием центров кристаллизации. При изменении режима наплавки меняются процесс расплавления материала и химическая однородность наплавленного слоя. На свойства покрытий оказывает влияние содержание сохранность упрочняющих фаз, размеры и их расположение в матричном материале.

Графики изменения микротвердости покрытий, наплавленных электродами Т590, представленные на рисунке 2, свидетельствуют о характере приведенных зависимостей.

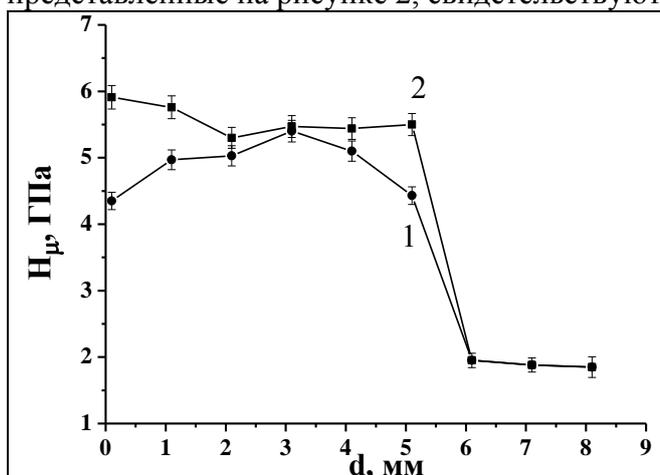


Рисунок 2. Изменение микротвердости по глубине стальной основы и наплавленных покрытий: 1) на постоянном токе, 2) на импульсном режиме.

Таким образом, использование технологии импульсно-дуговой наплавки позволяет через программируемый ввод тепла в зону покрытия управлять процессами плавления и переноса каждой капли электродного металла и измельчать структуру металла покрытия и повышать его свойства. Покрытие, наплавленное на импульсном режиме, имеет более однородную структуру. Опробовано восстановление геометрических размеров изношенных изделий с применением импульсно-дуговой наплавки электродами, близкими по своим свойствам основного металла изделия, и последующее упрочнение поверхностного слоя восстановленных изделий электродами

Т590, обеспечивающих им повышение физико-механических свойств.

**Работа выполнена в соответствии с программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, проект III.23.2.1.*

DOI: 10.17223/9785946218412/414

CONTROL OF STRUCTURE AND PROPERTIES OF DEPOSITED WEAR-RESISTANT COATINGS BY MODIFICATION OF THE MELT OF THE LOW-FREQUENCY MODULATION TAKE

Saraev Y.N., Bezborodov V.P., Perovskaya M.V., Semenchuk V.M.
Institute of strength physics and materials science SB RAS, Tomsk
litsin@ispms.tsc.ru

Annotation. The work investigated the influence of modes of electric arc welding of steel 09G2S electrodes T590 on the properties of the coatings.

The influence of electric arc influence on the structure, physical, mechanical and operational properties of coatings deposited by T590 electrodes was studied.

It is found that this modification allows to increase the uniformity of the structure of the deposited coatings, grind it and increase the hardness. Application of the method of pulsed arc welding saves in the coatings, deposited electrodes T590, previously formed the reinforcing phase.

Electric arc welding with electrodes is an economical and widely used in industry method of restoring machine parts and mechanisms, giving their working surface wear resistance [1, 2]. The most common wear-resistant surfacing materials include alloys with chromium, tungsten, boron, molybdenum, etc., the wear Resistance of these surfacing materials is highly dependent on the type and quantity of these phases in the alloys.

Deposition processes due to differences in heat inputs and properties of electrode materials have a specific effect on the properties of coatings. The decrease in the properties of the deposited metal occurs due to defects that may occur during the deposition [3-4]. This can lead to accelerated destruction of coatings [5-8]. Modern methods of surfacing allow to regulate the cooling rate of the coating material and control the processes of melting and crystallization, the formation of the structure and physical and mechanical properties [1-2].

An important task is to study the influence of technological modes of deposition of electrodes on the characteristics of the coatings by using pulsed processes that reduce the heat input and structural heterogeneity of the metal. Purpose: to Improve the properties of the deposited coatings using pulsed arc methods.

Materials and methods of research. The study of the deposited layers obtained by welding electrodes T 590. As a substrate on which surfacing was made, samples of steel 09G2S were used. Surfacing was carried out by the FEB-315 MAGMA power source with the Pulse console for the implementation of the pulse-arc process. For surfacing coatings used methods: a) direct current, b) pulse mode with frequency modulation current within 1 - 5 Hz. Registration of the parameters of the electrode deposition process was carried out using a digital oscilloscope AKIP 4122/1V. The microstructure was investigated by optical microscope NEOPHOT-21 in a section perpendicular to the longitudinal axis of the deposited coating. The microhardness of the deposited coatings, the heat-affected zone and the base metal was measured on the Leika microhardometer at a load of 0.5 N on the indenter.

The possibility of obtaining the necessary coating composition is determined by the initial concentration of elements and the degree of absorption of these elements by the metal during the formation of the drop and the melt bath.

Research results and discussion. Characteristic oscillograms of current and voltage on the arc when surfacing with coated electrodes are shown in figure 1.

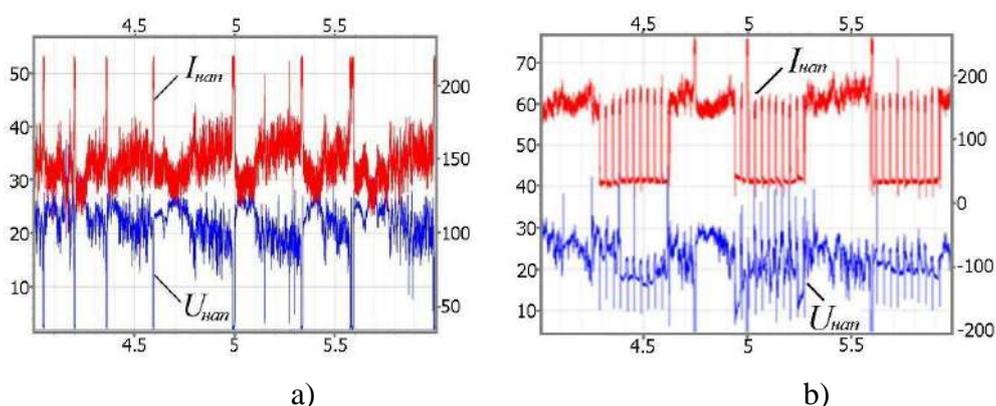


Figure 1. Typical oscillograms of current and voltage during surfacing coated electrodes: a) – direct current deposition mode, b) – mode of welding with modulated current; I NAP – current welding , U surfacing voltage.

Microstructure studies were carried out in the Central parts of the first and second layers of deposition by electrodes, in the transition zone from the coating to the base metal - in the areas of overheating and normalization. The microstructure of the base metal 09G2S is perlite and ferrite with a grain size of ≈ 4.7 microns. The volume fraction of perlite is ≈ 20 %. In surfacing coating electrodes T 590 is formed malagentia the structure of the metal coating (figure 2).

The microstructure of HAZ consists of several sections after surfacing: area of overheating with widmanstatten structure and area normalization is characterized by more fine-grained ferrite-perlitic structure. In the initial state, the base metal - steel 09G2S has a hardness of ~ 250 HV. The hardness of the coating material deposited by the coated electrodes is $\sim 270-300$ HV. ZTV hardness: 210-230 HV.

As a result of the pulse mode of surfacing grain size coatings and the width of the heat affected zone is smaller.

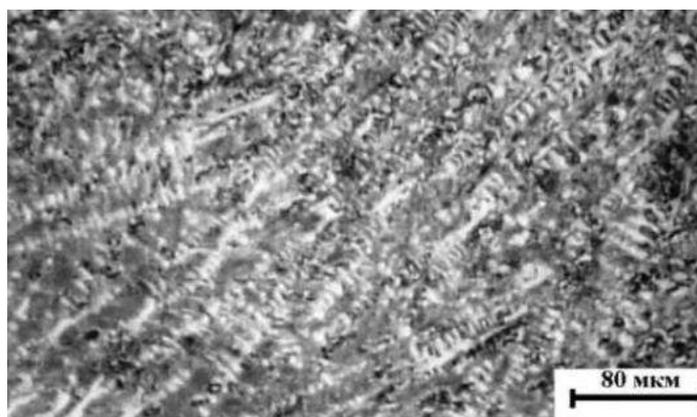


Figure 2. Dendritic structure of the coating deposited by electrodes T 590.

This indicates an increase in the quality of the deposited coating. When applying the coating on a DC mode, the heating temperature of the surfacing bath is higher, which, as a consequence, causes the growth of grain. When coating on pulse modes, by directed low-frequency high-energy action of the electric arc on the formed metal, due to the constant reciprocating motion of the melt with the frequency of current modulation, a more homogeneous structure with smaller structural components is formed. This formation of the coating metal is a consequence of the active mixing of the melt, which helps to equalize its heat content by controlling the movement of the metal in the weld pool, and also regulates the amount of molten metal under the arc to the beginning of the current pulse, thereby reducing the penetration depth. The periodic movement of the metal in the melt also contributes to a more uniform distribution of alloying elements in the volume of the molten metal.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

The use of pulsed-arc deposition technology with coated electrodes allows to control the processes of crystallization of the molten metal through programmable heat input into the coating zone, and, as a result, to grind the structure of the coating metal and improve its properties. For manual arc welding not provided by management cepaperason. When surfacing carbon steels hardening occurs due to the formation of a new surface layer. The properties of the deposited surface of steels depend on the type of alloying elements that determine the phase composition, phase transition boundaries and mechanical characteristics. The structure of the deposited metal and its properties are influenced by the technological parameters of the electrode deposition process, the number and size of the alloying elements.. The properties of the coatings deposited by the electrodes are influenced by the carbon content, preservation of the reinforcing phases (carbides, borides, etc.) in the process of surfacing, their size and location in the matrix material. The coating deposited using the pulse mode have: 1) ledeburite structure - electrodes T 590 (figure 3).

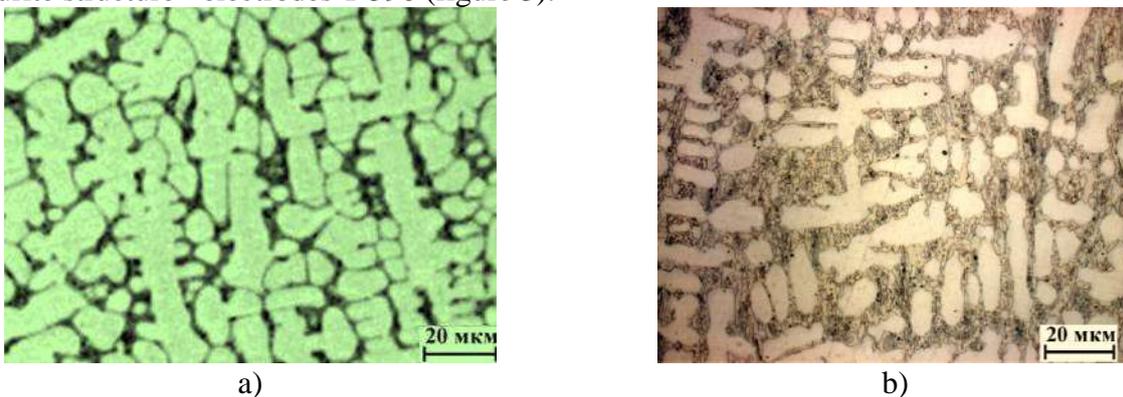


Figure 3. The structure of the deposited coating electrodes T 590 (a, b) on the modes: DC (a), pulse changes in the energy parameters of the mode (b).

In the process of the thermodeformation cycle of deposition of coatings by electrodes, as a rule, there is a formation of cracks (hot and cold), which leads to a decrease in the properties, which are lower, the higher the structural heterogeneity in the coating. By grinding the structure and reducing the structural heterogeneity, on the contrary, the properties of coatings are increased. Grinding of the coating structure obtained using a pulsed mode leads to an increase in its properties: hardness, wear resistance and other indicators [1-5].

This can be due to changes in the temperature in the area of the heat source during the deposition process, often exceeding the melting point of even refractory compounds when surfacing at a constant current. As a consequence, this leads to their dissolution in the bath melt. In the case of pulsed deposition mode can be achieved the formation of a metal, regardless of the brand of the electrode used, with a more uniform and fine-grained structure. The graph of changes in the microhardness of the electrode coatings T 590, deposited on the pulse mode, the zone of thermal influence and the base is shown in figure 4.

The average value of microhardness of coating metal is higher than 5000 MPa. The anal dependence is observed after surfacing in DC mode, only with lower values of microhardness of the coating.

Summary

1. The influence of modification by electric arc influence at pulse-arc surfacing by T 590 electrodes on the structure and properties of coatings is studied. Modification of materials of surfaced coatings on low-carbon steel 09G2S can improve the uniformity and dispersion of the structure, as well as hardness.

2. Using the method of pulse-arc surfacing of coatings deposited with electrodes T 590 allows them to retain the reinforcing phase.

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

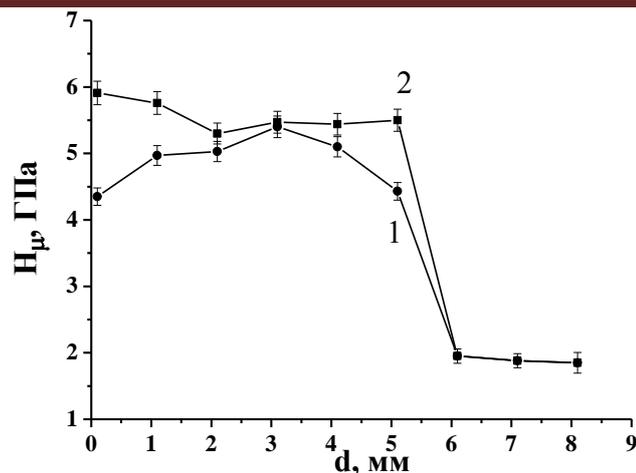


Figure 4. The change of microhardness the depth of the steel base and the deposited coatings: 1) direct current, 2) pulse mode.

**The work was carried out within the framework Of fundamental research programs of the state academies of Sciences for 2018-2020, project III.23.2.1*

- [1] E.I. Kivineva Particulate - reinforced metal matrix composite as a weld deposit/E. I. Kivineva, D.L. Olson, D.K. Maltock//Welding Journal. - 1995. - N 3. - P. 83-92.
- [2] B. Cantor, I.T.H. Chang, P. Knight, A.J. B. Vincent Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys//Materials Science and Engineering. - 2004. - P. 213-218.
- [3] Y.J. Zhou, Y. Zhang, Wang F.J., Wang Y.L., Chen G.L. Effect of Cu addition on the microstructure and mechanical properties of AlCoCrFeNiTi0.5 solid-solution alloy//Journal of Alloys and Compounds. - 2008. - V. 466. – P. 201–204.
- [4] Sheng Guo, Ng Chun, Lu Jian, C.T. Liu Effect of valence electron concentration on stability of fcc or bcc phase in high entropy alloys//Journal of Applied Physics. - 2011.- V. 109. - № 10. - P. 103505.
- [5] Sheng Guo, C.T. Liu Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase//Progress in Science: Materials International. - 2011. - V. 21. - P. 433-446.
- [6] Jien -Wei Yeh, Shou -Yi Chang Yu - Der, Hong, Swe - Kai Chen, Su - Jien Lin. Anomalous decrease in X-ray diffraction intensities of Cu-Ni-Al-Co-Cr-Fe-Si alloy systems with multi-principal elements//Materials Chemistry and Physics. - 2007. - V. 103. - P. 41-46.
- [7] Yu.N. Saraev, V.P. Bezborodov, A.A Grigoryeva, N.I. Golikov, V.V. Dmitriev, I.I. Sannikov. Distribution of residual stresses in welded joints in 09G2S steel produced by adaptive pulsed-arc welding//Welding International. - 2015. - V. 29. - №. 2. - P. 131-134.
- [8] Yu.N. Saraev, V.P. Bezborodov. Effect of the Energy Parameters of the Welding Process on the Structure and Properties of welded Joints in low-alloy Steels//Welding International. - 2013. - №. 9. - P. 678-680.

DOI: 10.17223/9785946218412/415

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ТРИБОЛОГИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ ПРИ АДГЕЗИОННОМ ТРЕНИИ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ НАГРУЗОК И СЛОЖНОЙ КОНФИГУРАЦИИ КОНТРЕЛА

Чумаевский А.В., Гусарова А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А., Иванов А.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Исследованиям пластической деформации и фрагментации материалов при сварке трением с перемешиванием и фрикционной перемешивающей обработке в настоящее время посвящено большое число работ как в отечественном, так и в зарубежном научно-исследовательском секторе. Основные работы, касающиеся процесса сварки трением с перемешиванием, посвящены технологической стороне данного аспекта, заключающейся в соединении между собой различных материалов с однородной или разнородной структурой. При этом небольшое количество работ посвящено фундаментальной стороне изучения процесса формирования структуры при движении материала вокруг инструмента с достаточно сложной конфигурацией пина и плеч в процессе сварки или обработки трением с перемешиванием. На настоящее время процесс пластической деформации в материалах в условиях адгезионного трения достаточно детально изучался в испытаниях как по схеме "диск-палец", так и по схемам "диск-кольцо", "диск-диск" и др. Исследовались режимы трения образцов в широких пределах с механизмами изнашивания от нормального механохимического износа до образования в поверхностных объемах образцов фрагментированного наноструктурированного зеренно-субзеренного слоя, в котором за счет механизмов зернограницного скольжения реализован процесс как ламинарного, так и турбулентного течения материала в направлении трения. Одним из основных механизмов формирования зоны перемешивания при фрикционной перемешивающей обработке или сварке является процесс деформации до образования такого слоя и его сложное движение по контуру инструмента, имеющему различные составляющие, такие как "пин" или "плечи". В настоящей работе целью исследований являлось изучение формирования потоков материала вокруг инструмента при адгезионном трении с высокой нагрузкой алюминиевых сплавов в паре со стальными контртелами сложной формы для установления закономерностей течения материала по контуру различных составляющих инструмент для сварки трением с перемешиванием элементов.

В работе исследовано взаимодействие с контртелом в виде "клина", "шара" и "кольца" материала алюминиевого сплава в условиях трения с нагрузкой до 400-700 кг и скоростью вращения до 700 об/мин. Форма контртел имитировала процесс внедрения инструмента, его вращение внутри образца и движение зоны касания "плеч". Образцы испытаны на лабораторной установке для сварки трением с перемешивания в Институте физики прочности и материаловедения. Процесс трения происходил после внедрения под заданной нагрузкой контртела в образец от 30 секунд до 2 минут. После проведения испытаний образцы подвергались разрезке на электроискровом станке и исследованиям с использованием растровой электронной и оптической микроскопии.

Проведенные исследования показывают, что при трении с высокой нагрузкой и скоростью вращения по контуру зоны контакта образца и контртела в структуре алюминиевого сплава происходит образование потоков металла различной структурной конфигурации, четко выделяющихся на обзорных изображениях зоны пластической деформации образцов. При трении с шарообразным контртелом в структуре выделяется наличие тороидальных потоков, в структуре образцов, испытанных с контртелом в виде кольца - преимущественно ламинарное течение материала. В образцах в виде конического "клина" при внедрении и последующем трении образуется зона пластической деформации с течением материала в основном вдоль конуса контртела с наибольшей интенсивностью на краях конуса и наименьшей - в центральной части. Таким образом, экспериментально получены при фрикционном контакте с большой нагрузкой различные по своей конфигурации и особенностям потоки материала в зоне перемешивания.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23, и при поддержке РФФИ и Администрации Томской области (проект № 18-48-703046 p_мол_a).

DOI: 10.17223/9785946218412/416

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ТРИБОЛОГИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ ПРИ АДГЕЗИОННОМ ТРЕНИИ С ВНЕДРЕНИЕМ УЛЬТРАЗВУКА В ЗОНУ ТРЕНИЯ

Чумаевский А.В., Гусарова А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А., Иванов А.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Процесс фрикционного перемешивающего взаимодействия в условиях сварки или обработки трением с перемешиванием происходит сложным и неоднородным образом, что приводит к образованию структуры со слоистым строением, четко выделяющейся при исследованиях материала с применением оптической, растровой электронной микроскопии или EBSD-анализа. При сварке разнородных материалов процесс фрикционного перемешивающего взаимодействия в условиях высокой температуры приводит к образованию интерметаллидных прослоек, снижающих прочность и пластичность соединения и создающих ограничения на свариваемость материалов. При сварке материалов со структурой на основе одного металла в условиях использования, например, термически упрочняемого металла или сплава, возможно снижение эксплуатационных характеристик при изменении объемной доли или распределения частиц вторичных фаз за счет избыточного выпадения при избыточном тепловом воздействии. Внедрение ультразвукового воздействия в процессе сварки трением с перемешиванием позволяет расширить границы технологических режимов для получения неразъемных соединений из различных металлов и сплавов. При этом процесс пластической деформации и фрагментации при сварке трением с перемешиванием является многофакторным и зависит от большого числа переменных. Для определения механизмов воздействия ультразвука на процесс фрагментации в условиях фрикционного перемешивания в настоящей работе проведены исследования деформационного поведения алюминиевого сплава при адгезионном высоконагруженном трении в паре со стальным контртелом с внедрением ультразвукового воздействия в процессе испытания.

Исследовательские испытания проводили на лабораторной установке для сварки трением с перемешиванием в Институте физики прочности и материаловедения. Скорость вращения контртела в процессе испытания составляла от 500 до 700 об/мин. Нагрузка на образец изменялась в пределах от 300 до 700 кг. Мощность вводимого ультразвукового воздействия составляла не более 1 кВт. В качестве материалов были выбраны образцы термически упрочняемого сплава Д16 и термически не упрочняемого АМг5. После испытаний образцы подвергались резке на электроискровом станке и исследованиям металлографических шлифов на оптическом и растровом электронном микроскопах.

Проведенные исследования показывают, что в процессе фрикционного взаимодействия при внедрении ультразвука происходит перераспределение компонентов сплава с изменением объемной доли интерметаллидных фаз. При этом общий характер трения в условиях высокой нагрузки и скорости вращения сохраняется, в поверхностных слоях образуется фрагментированный слой с зеренно-субзеренной структурой - зона перемешивания, при отдалении от зоны перемешивания располагается зона термомеханического влияния, далее зона термического влияния. Происходит изменение размеров зон перемешивания и термомеханического влияния, четко выделяющееся по изменению травимости в сплаве Д16 при исследовании травленных шлифов методом оптической микроскопии. В сплавах обоих типов четко выражены описанные выше изменения, но более ярко влияние внедрения ультразвука прослеживается для сплава Д16. Таким образом, в работе прослежено влияние внедрения ультразвукового воздействия на структуру алюминиевых сплавов в условиях интенсивного термомеханического воздействия при адгезионном трении.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23, и при поддержке РФФИ и Администрации Томской области (проект № 18-48-703046 p_мол_a).

DOI: 10.17223/9785946218412/417

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И АДГЕЗИЯ МЕДНО-ЦИНКОВЫХ ПОКРЫТИЙ, СФОРМИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА МЕТОДОМ ФРИКЦИОННОЙ ПЕРЕМЕШИВАЮЩЕЙ ОБРАБОТКИ

Чумаевский А.В., Гусарова А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А., Иванов А.Н.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Формирование композиционных материалов на металлической основе является одним из наиболее перспективных направлений развития прикладной области промышленности и материаловедения. В настоящее время имеется большое количество методик формирования металлических функционально градиентных полиматериалов, к которым относятся различные методики аддитивного производства, осаждения металлических покрытий из газовой или жидкой фазы и др. Одним из методов, позволяющих получать композиционные материалы или металлические детали с покрытиями из разнородных сплавов без плавления, является перемешивающая фрикционная обработка. С помощью данной технологии получают как структуры с измененным строением поверхностного слоя из измельченного металла исходного материала, так и полностью отличным от исходного сплава состоянием за счет внедрения в поверхностный слой другого материала. При этом в результате образования интерметаллидных фаз возможно образование структур слабо связанных со структурой основного металла, в связи с чем в настоящее время имеется задача: получение полиметаллических структур в поверхностных слоях из структурно-разнородных материалов и повышение адгезии покрытий к подложке и в целом механических свойств, чего можно добиться путем проведения комплексных многоуровневых исследований структуры и механических свойств таких систем. В настоящей работе производилось получение покрытий из смеси материалов подложки - сплава АМг5 и медного сплава Л63, методом фрикционной перемешивающей обработки.

Работа выполнялась на экспериментальном оборудовании для сварки трением с перемешиванием в Институте физики прочности и материаловедения. Образцы получали вмешиванием в поверхностный слой сплава АМг5 материала листового проката сплава Л63 толщиной 2 мм инструментом для сварки трением с перемешиванием от 2,5 до 3 мм. Полученные структуры исследованы методами оптической и растровой электронной микроскопии. Проведение экспериментальных исследований на определение адгезии происходило на универсальной испытательной машине с использованием образцов крестообразной формы (для осуществления отрыва покрытия от подложки). Испытания на растяжение проводились на образцах, вырезанных вдоль линии обработки.

Проведенные испытания показывают достаточно высокую прочность сцепления покрытия и подложки в испытаниях на отрыв, но при этом в ряде экспериментов адгезия покрытия к подложке оказывалась недостаточной, и происходил отрыв покрытия от подложки по контуру линии соприкосновения (рисунок 1).

Напряжение отрыва покрытия от подложки для таких образцов составляло 55 МПа и менее, в то время как для образцов с нормальной связью покрытия и подложки отрыв происходил при напряжениях более 120-150 МПа и вплоть до разрушения образца по краю без отрыва покрытия. Для данных образцов характерно также и падение механических свойств в испытаниях на растяжение вдоль линии обработки.

В структуре образованного излома в данном случае наблюдается большое количество трещин и включений меди или твердых растворов на основе меди (рисунок 2). Отсутствие большого количества следов пластического деформирования в зоне отрыва свидетельствует об охрупчивании материала в зоне контакта.

Проведенные испытания показывают, что в образцах с покрытиями из сплавов на основе разнородных металлов возможно получение покрытий с высокой адгезией, но при отдельных

Секция 8. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

сочетаниях параметров процесса происходит охрупчивание материала в граничной зоне и резкое падение прочности сцепления с подложкой и механических свойств.

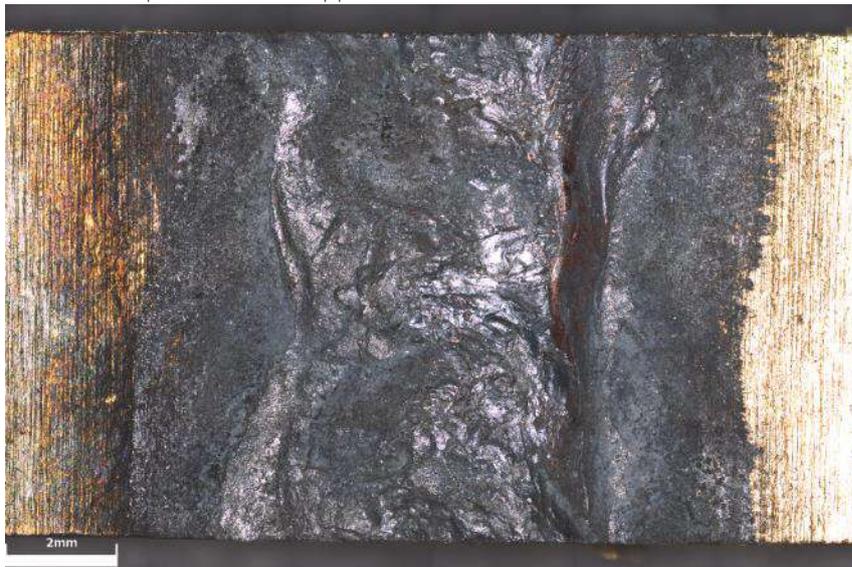


Рисунок 1. Область отрыва покрытия от подложки

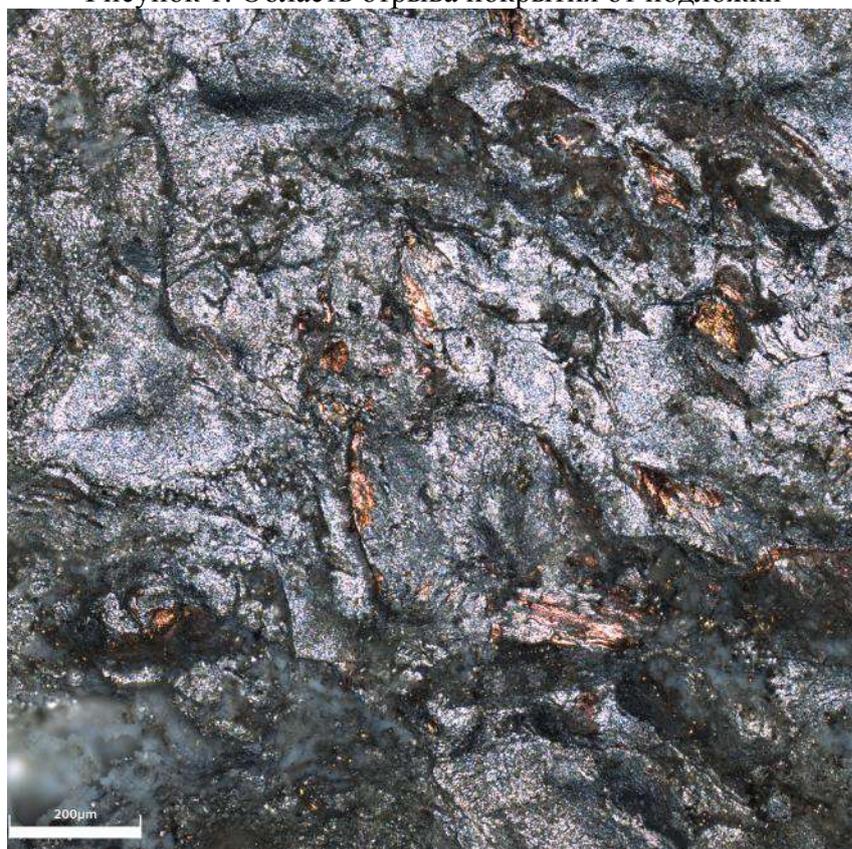


Рисунок 2. Строение излома после испытания на адгезию

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23, и при поддержке РФФИ (проект № 18-38-00645 мол_a).

DOI: 10.17223/9785946218412/418

ЦИКЛИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ НЕРАЗЪЕМНЫХ СОЕДИНЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ГИБРИДНОЙ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКИ ИЗ СТАЛИ 12X18H10T

Иванов А.Н., Гусарова А.В., Чумаевский А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Одним из наиболее производительных методов создания неразъемных соединений сталей и сплавов является гибридная лазерная сварка. Данная технология основана на использовании для создания дополнительного нагрева в зоне сварки лазером электрической дуги, способствующей полному проплавлению металла на всю толщину листового проката, в том числе большой толщины. Среди используемых в промышленности металлов и сплавов для изготовления резервуаров, работающих в условиях низких температур и агрессивных сред, является аустенитная нержавеющая сталь 12X18H10T. Аустенитные стали обладают хорошей свариваемостью, и сварные конструкции из данных материалов применяются в широком спектре изделий. Неразъемные соединения, получаемые в ранее выполненных работах, как показали ранее проведенные исследования, полученные соединения обладают высокой прочностью на изгиб, растяжение и ударную вязкость. Но в настоящее время для соединений, полученных гибридной лазерной сваркой, в том числе с ультразвуковым воздействием, нет сведений о свойствах в условиях испытаний на мало- и многоцикловую усталость, хотя при различных условиях эксплуатации возможно более существенное влияние на изделия именно циклического характера нагружения. В связи с вышеуказанным целью настоящей работы является исследование взаимосвязи режима испытания неразъемных соединений стали 12X18H10T, полученных гибридной лазерной сваркой, на количество циклов до разрушения и закономерности пластической деформации и разрушения при малоцикловой усталости.

Образцы получены при различных параметрах мощности лазерного луча и электрической дуги на оборудовании ЗАО "Чебоксарское предприятие "Сеспель". Из экспериментальных образцов производилась вырезка образцов для испытаний на малоцикловую усталость на универсальной испытательной машине BISS UT-04-0100. Частота циклирования изменялась от 10 Гц до 80 Гц, наименьшее напряжение в цикле - $0,3\sigma_b$, наибольшее напряжение в цикле - $0,65-0,95\sigma_b$. После испытаний производились исследования строения изломов на растровом электронном микроскопе Zeiss LEO EVO 50 в режиме вторичных электронов.

Проведенные исследования показывают, что пластическая деформация и разрушение в стали 12X18H10T при различных режимах циклирования происходит аналогично с другими металлами и сплавами. При больших значениях максимального напряжения в цикле $0,95\sigma_b$ пластическая деформация достигает достаточно больших величин с образованием в образце "шейки" перед разрушением. Изломы имеют структуру, характерную и для разрушения при статическом растяжении, с вязким ямочным строением. Локализация разрушения при этом в большинстве образцов приходится на случайное место в образце за пределами сварного шва. При меньших максимальных напряжениях в цикле $0,65\sigma_b$ локализация деформации происходит без образования "шейки", и разрушение в этом случае происходит в центральной области сварного шва. Строение изломов характерно для усталостного разрушения. Для больших напряжений характерны небольшие количества циклов - менее 20 тысяч, для деформации при небольших напряжениях при испытаниях образцы демонстрируют более 110 тысяч циклов. Таким образом, проведенные испытания показывают, что образцы неразъемных соединений из стали 12X18H10T показывают достаточно высокие значения количества циклов до разрушения в испытаниях на малоцикловую усталость.

Работы выполнены при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (Соглашение № 14.607.21.0190, идентификатор проекта RFMEFI60717X0190).

DOI: 10.17223/9785946218412/419

СКАНИРУЮЩАЯ ТУННЕЛЬНАЯ МИКРОСКОПИЯ ПОДЛОЖКИ ИЗ СТАЛИ 09Г2С ПОСЛЕ ИСПЫТАНИЯ НА УДАРНУЮ ВЯЗКОСТЬ В СОСТАВЕ КОМПОЗИЦИИ «ПОДЛОЖКА– ПОКРЫТИЕ» И ЕЕ МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

^{1,2}Панин В.Е., ^{1,2}Кузнецов П.В., ¹Гальченко Н.К.

¹ Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia

²National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

В настоящее время большое внимание уделяется разработке и совершенствованию композиционных покрытий, полученных методом ручной дуговой наплавки и работающих в условиях абразивного изнашивания и ударных нагрузок. Для улучшения таких показателей как износостойкость, пластичность, хладостойкость, трещиностойкость наиболее перспективным является модифицирование структуры наплавленных слоев путем введения в сварочную ванну легирующих компонентов и тугоплавких соединений, например, микродисперсных частиц карбонитридов титана $TiC_{0.5}N_{0.5}$

Вместе с тем, механические свойства композиции «наплавка – стальная подложка» определяются не только свойствами наплавленного слоя, но и свойствами материала основы, зависящими от структуры и размера зон сплавления и термического влияния и их химического состава, обусловленного процессами перемешивания и диффузионного перераспределения элементов между твердой и жидкой фазами в процессе наплавки. Наличие зон термического влияния в композиции «наплавка – подложка» особенно резко проявляется при их эксплуатации в условиях динамических и циклических нагрузок.

В настоящей работе исследовали материал подложки (сталь 09Г2С) после испытания на ударную вязкость образцов с покрытиями, полученными электродуговой наплавкой электродами МР-3 (ГОСТ 9466-75), содержащими СВС-частицы $TiC_{0.5}N_{0.5}$ размером 400~700 нм. Расчетное содержание карбонитридов в опытных образцах составляло 0,15, 0,25 и 1,0 мас.%. Толщина наплавленного слоя – 3 мм. Образцы для испытания на ударную вязкость с V-образным надрезом глубиной 2 мм имели размер 10×10×55 мм. Толщина модифицированного покрытия в вершине V-образного надреза – 1 мм. Результаты исследования наплавки с добавками наночастиц карбонитридов титана изложены в [3].

Образцы стали 09Г2С толщиной около 1 мм вырезали из композиции «подложка – покрытие» на расстоянии около 3 мм от границы раздела между наплавкой и подложкой после испытания на ударную вязкость. В образцах стали 09Г2С, вырезанных из композиций «подложка – покрытие» с 0,15вес.%TiCN и 0,25мас.%TiCN наблюдали увеличение модулей Юнга по сравнению с исходным состоянием стали на 4 и 20% соответственно. С помощью СТМ выявлены морфологические признаки образования верхнего и нижнего бейнита в подложке с покрытием 0,25мас %TiCN. Анализ профилей поперечного сечения бейнитной структуры, показал, что ее образование может объясняться в рамках симпатического зародышевого механизма продольного роста. Обсуждаются механизм структурных изменений материала подложки при нанесении покрытия и в процессе испытания на ударную вязкость и влияние изменений структуры на механические свойства композиции «подложка-покрытие».

1. Dong.J., et al. (2017). doi org/10.1016/j.fusengdes.2017.05.084.

2. V. V. Golovko, V. A. Kostin, and G. M. Grigorenko, Paton Welding J. 7, 11–17 (2011).

2. P. V. Kuznetsov, N. K. Galchenko, T. V. Rakhmatulina, V. P. Samartsev, K. A. Kolesnikova, R. S. Laptev, M. N. Babikhina, AIP Conference Proceedings 1909, 020114 (2017); <https://doi.org/10.1063/1.5013795>

Секция 9. Иерархическая организация
объектов в геодинатике

DOI: 10.17223/9785946218412/420

**КОМБИНИРОВАННЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ПОДХОД ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ОПОЛЗНЕВЫХ ЯВЛЕНИЙ**

¹Малинникова О.Н., ¹Трофимов В.А., ¹Шиповский И.Е., ²Wen-Jie Xu,

¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки*

Институт проблем комплексного освоения недр

им. академика Н.В. Мельникова Российской академии наук

²*State Key Laboratory of Hydrosience and Hydraulic Engineering, Department of Hydraulic Engineering, Tsinghua University, Beijing, China*

Поведение крупномасштабных горнопородных масс с большими деформациями определяет основу работы и производительность геотехнических сооружений и горных предприятий и должно быть должным образом учтено при их моделировании, анализе и проектировании. Для быстрого принятия решений по предотвращению и минимизации ущерба от опасных оползневых явлений большое значение имеет оперативная оценка их геомеханических параметров. Пример этому недавний оползень на Бурейском водохранилище, произошедший 11 декабря 2018 г., который вызвал полное перекрытие каньонной части, прекратив сток воды между равнинными участками и тем самым создав угрозу подтопления объектов социально-экономической и транспортной инфраструктуры. В этой связи анализ устойчивости склонов неизменно актуален для оценки инженерно-геологических опасностей. На сегодняшний день наиболее популярным подходом, применяемым в прогнозе устойчивости склонов, является метод предельного равновесия в сочетании с современными методами компьютерного моделирования. Так метод сглаженных частиц (SPH) положительно зарекомендовал себя при решении краевой задачи с большими деформациями и проявлениями динамического разрушения бортов карьера [1,2], рассматриваемых как гомогенной сплошной материал. Метод дискретных элементов (DEM) [3] используется для получения нелинейного отклика материала от малой деформации до конечной деформации и дает преимущество в расчете сил взаимодействия между отдельными блоками массива склона без предположений о гомогенности материала. В настоящее время известно, что механизмы иерархического взаимодействия многоуровневых геомеханических процессов в значительной степени определяют нелинейное поведение сложных природных систем при различных внешних воздействиях. В работе представлена новая схема иерархической связи в интеграции методов SPH и DEM для многомасштабного моделирования больших деформаций в анализе устойчивости склонов. Предложенная структура связывания не только наследует преимущества SPH в решении масштабных инженерных задач деформации по сравнению с использованием сеточных методов, где затруднительно избежать искажения сетки, но также позволяет при помощи DEM моделирования связать информацию о масштабе зерна и ключевые микромеханические механизмы с макроскопическим описанием гранулированных геосред на всех уровнях деформации, от начальной стадии малых деформаций на пути к режиму больших деформаций до разрушения.

Для демонстрации возможностей, новой платформы SPH-DEM в данной работе моделирование разрушения борта карьера выполнено для условий плоской деформации. Имитируется полная выемка массивного блока горной породы за короткий отрезок времени. Используется модель упруго - пластической деформации, параметры которой зависят от показателя накопления повреждений, определяемого по аппроксимации критерия Кулона - Мора, известной как соотношение Друккера - Прагера. Кроме того, применяемый численный метод сглаженных частиц реализует двойственную модель представления повреждаемости геосреды, которая отражает разрыхление горной породы при выполнении заданного критерия разрушения и расхождение частиц материала при потере действия сил взаимосвязи, определяемых алгоритмом численного метода. Эти качества позволяют достаточно реалистично моделировать процессы развития деформаций и разрушения.

На рисунке 1 представлены расчетные картины разрушения массива, подработанного выемкой крупного блока, представляющие динамическое сдвигание, разрушение и фрагментацию горной породы под действием собственного веса всей нависающей толщи породы по высоте.

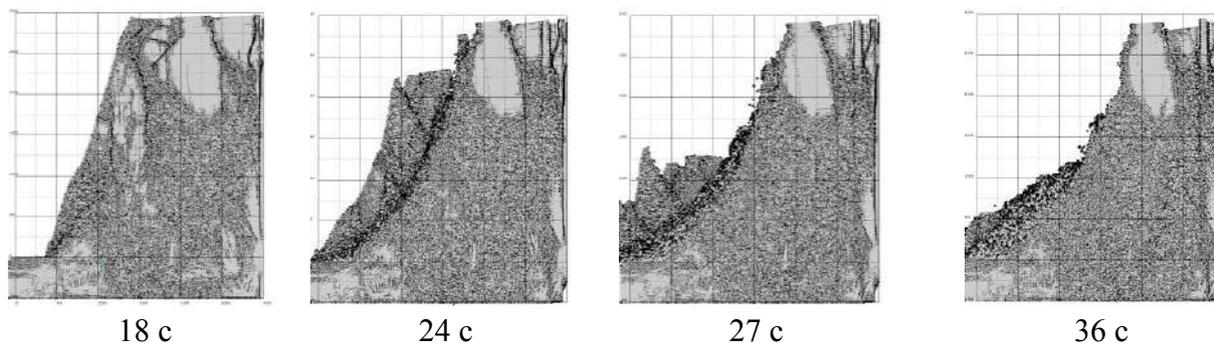


Рис. 1. Рассчитанная кинограмма сдвижения породы склона карьера

Это динамическое сдвигание заканчивается обрушением породы на дно карьера. Процесс последовательной фрагментации, формирования крупных блоков и их динамического сдвигания объясняет системное проявление геодинатических явлений, проявляющихся в виде кластеров на сейсмограммах полученных в размещенных в толще массива сейсмодатчиках.

Расчеты позволяют оценить последствия обрушения и получить рекомендации по проведению мероприятий для укрепления склона в зависимости от параметров породы окружающего массива.

1. Трофимов В.А., Шиповский И.Е. Компьютерное моделирование динамического разрушения бортов карьера // Материалы Пятой международной конференции «Триггерные эффекты в геосистемах», Москва, 2019.
2. Малинникова О.Н., Трофимов В.А., Шиповский И.Е. Метод сглаженных частиц в моделировании разрушения и обрушения кровли выработки // Материалы Международной научно-практической конференции «Подземная угледобыча XXI век». 2018.Т. 2 С. 464-475.
3. Wen-Jie Xu, Guang-Yu Liu, Daniel N. Wilke, Trofimov V. A. 3D random Voronoi models for simulation of rock fractures based on GPU-accelerated discrete element method // Материалы «1 Международной научной конференция «Проблемы геомеханики сильно сжатых горных пород и массивов». Владивосток, 2019.

DOI: 10.17223/9785946218412/421

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ ПРИ ВНЕШНЕМ ИНИЦИИРОВАНИИ ДИНАМИЧЕСКОГО СРЫВА

Остапчук А.А.

Институт динамики геосфер Российской академии наук им. М.А.Садовского, Москва

Согласно современным представлениям, крупные землетрясения происходят в результате проскальзывания по уже существующим разломам и крупным трещинам. Для возникновения быстрого фрикционного проскальзывания должны выполняться ряд условий. Зона локализации деформаций должна проявлять свойства скоростного разупрочнения, а реологическая жесткость разлома должна превышать жесткость вмещающего массива. В тоже время напряжения на разломе должны быть близки к пределу прочности. При этом если разлом находится в метастабильном состоянии, любое даже самое слабое воздействие может инициировать скольжение.

В настоящей работе в лабораторных экспериментах исследуются закономерности излучения АЭ в ходе лабораторного сейсмического цикла и проявления "внешнего" инициирования динамических срывов. Был проведен детальный статистический анализ излучения АЭ и особенности излучения АЭ при "внешнем" инициировании. Анализ АЭ на постдинамической стадии сейсмического цикла дает принципиальную возможность говорить об особенностях инициирования динамических срывов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 17-05-01271).

DOI: 10.17223/9785946218412/422

УПРУГИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ПРИ УЧЕТЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И РАЗМЕРОВ

Чертова Н.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Реальные материалы и среды, к числу которых относятся композиты, поликристаллы, пористые и геологические среды, имеют иерархически организованную внутреннюю структуру, важным элементом которой являются границы раздела. В монокристаллах элементы структуры и границы раздела формируются в процессе деформации. Границы раздела представляют двумерные дефекты и оказывают существенное влияние на физические и эксплуатационные свойства материалов и сред, определяя закономерности процессов деформации и разрушения твердых тел.

Напряженно-деформированное состояние формируется в процессе распространения, взаимодействия и затухания волн. Для исследования напряженно-деформированного состояния на границе раздела рассмотрим задачу прохождения упругой волны через границу. Традиционно при решении этой задачи находятся коэффициенты Френеля и определяются потоки энергий вторичных волн [1]. Коэффициенты Френеля позволяют определить и проанализировать деформационные моды на границе, характеризующие формоизменение и поворот бесконечно малого элемента среды. Впервые это было сделано для свободной поверхности упругого тела. Аналогичная задача на границе раздела двух упругих тел при условии идеального контакта изучена в [2], в [3] рассмотрено условие идеального скольжения.

Классический подход механики сплошной среды предполагает, что граница раздела представляет бесконечно тонкий слой. В действительности граница имеет некоторый объем и обладает физико-механическими свойствами отличными от свойств контактирующих тел. Существует ряд подходов к построению моделей сред, структурная неоднородность которых обусловлена наличием границ раздела [4-5]. Рассмотрим закономерности деформаций на границах раздела, представляющих структурный элемент, в рамках модели блочных сред, предложенной Садовским [5]. Согласно этой модели граница обладает толщиной и характеризуется набором механических параметров, определяющих ее поведение. В данной работе на основе этой модели, широко используемой при численном моделировании динамического поведения структурно неоднородных сред [6], рассматриваются закономерности распространения упругих волн через границу раздела и исследуются деформации на границе в зависимости от ее размеров и свойств.

Как предполагается в модели [5], поведение упругих границ задается уравнением движения и законом Гука, на основе которых можно получить граничные условия для задачи контакта двух тел. В простейшем случае нормального падения продольной и поперечной волны граничные условия запишутся в виде

$$\rho_b \partial_i^2 (U_i^2 + U_i^1) / 2 = (\sigma_{zi}^2 - \sigma_{zi}^1) / h, (U_i^2 - U_i^1) / h = (\sigma_{zi}^2 + \sigma_{zi}^1) / (2L_b), i=z, y. \quad (1)$$

Здесь и далее все приводимые величины определены в декартовой системе координат x, y, z , связанной с границей, нормаль которой $n \parallel z$, U_i^1 , U_i^2 , σ_{zi}^1 , σ_{zi}^2 – смещения и напряжения в граничащих средах, ρ_b , L_b , μ_b – плотность и упругие модули границы, h – толщина границы. В случае падающей волны сдвига ($i=y$) вместо модуля L_b во втором выражении (1) необходимо использовать $2\mu_b$. Выражения (1) получены на основе уравнения движения и закона Гука при замене пространственных производных дискретными выражениями и величин на границе средними значениями в контактирующих средах. При $h \rightarrow 0$ из (1) следуют условия идеального контакта.

$$U_i^2 - U_i^1 = 0, \sigma_{zi}^2 - \sigma_{zi}^1 = 0, i=z, y.$$

Подставляя в (1) выражения для смещений падающих U_i^0 , отраженных U_i^1 ($U_i^1 = U_i^0 + U_i^1$) и преломленных волн U_i^2 , а также найденные на их основе выражения для деформаций и напряжений, получим системы уравнений для определения коэффициентов Френеля.

Аналитические выражения для коэффициентов отражения и преломления существенно упрощаются в случае границы раздела двух одинаковых сред, что позволяет исследовать их экстремальные значения в зависимости от изменения безразмерных параметров, характеризующих толщину границы и ее упругие свойства. На основе аналитических решений были проанализированы условия резонансов для коэффициентов Френеля на границах раздела одинаковых и различных упругих сред. Коэффициенты Френеля и амплитуды деформаций на границе раздела различных упругих тел исследовались численно. В ходе проведенных расчетов были рассмотрены возможности экстремальных значений деформаций на границе в зависимости от размеров и упругих свойств границы для различных контактирующих тел.

Полученные результаты показывают, что напряженно-деформированное состояние на границе раздела упругих сред существенно зависит от используемой физико-математической модели границы. Границы, представляющие структурные элементы, по сравнению с классическим аналогом механики сплошных сред могут иметь деформации более опасные с точки зрения разрушения при определенных упругих свойствах контактирующих тел и границы, а также ее размеров. Это необходимо учитывать при прогнозировании разрушений структурно неоднородных тел и их эксплуатации.

1. Бреховский Л.М., Годин О.А. Акустика слоистых сред. М.: Наука. 1989. 416с.
2. Чертова Н.В., Гриняев Ю.В. Особенности напряженно-деформированного состояния на границе раздела упругих сред при идеальном контакте // Физ. мезомеханика. 2018. Т. 21. №. 2. С.56-67.
3. Чертова Н.В., Гриняев Ю.В. О характере деформаций на границе раздела упругих сред при условии скольжения // Письма в ЖТФ. 2018. Т. 44. В. 9. С.88-94.
4. Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V. Modeling of elastic waves in a blocky medium based on equations of the Cosserat continuum //Wave Motion. 2015.V. 52. P. 138-150.
5. Садовский М.А. Естественная кусковатость горной породы // ДАН СССР. 1979. Т. 247. № 4. С. 829-832.
6. Сарайкин В.А. Распространение низкочастотной составляющей волны в модели блочной среды // ПМТФ. 2009. Т. 50. № 6. С.177-185.

DOI: 10.17223/9785946218412/423

ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ ПОЛИМИНЕРАЛЬНЫХ УЧАСТКОВ КВАРЦ-ПИРИТОВОГО СОСТАВА (ГАБРИЭЛЕВСКОЕ РУДОПРОЯВЛЕНИЯ)

Лычагин Д.В., Зырянова Л.А., Бибко А.А.

*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия
bibko.geology@gmail.com*

Процессы формирования геологических структур при динамометаморфизме происходят при постоянном воздействии давления и температуры. Породы, представленные различными наборами минералов с различными свойствами, могут образовать разные деформационные структуры с помощью различных механизмов деформации: межзерновое проскальзывание, деформационное двойникование, статическая и динамическая рекристаллизация и т. д. Рассмотрение структуры пород и минералов, связанное с проявление выше названных механизмов может служить индикаторами условий их образования.

На месторождение Габриелевском, находящемся в центральной части Бутачихинско-Кедровской зоны на юго-западном крыле крупного Синюшинского горст-антиклинория, наблюдаются породы характерной структуры (милониты) с определенной минеральной ассоциацией: кварц (SiO_2), ортоклаз ($\text{K}(\text{AlSi}_3\text{O}_8)$), серицит ($\text{KAl}_2[\text{AlSi}_3\text{O}_{10}](\text{OH},\text{F})_2$) из рудных минералов присутствуют пирит (FeS_2), халькопирит (CuFeS_2), сфалерит (ZnS) и галенит (PbS).

Наиболее индикаторными, в данном случае, для определения параметров деформации, являются кварц и рудные минералы.

Были проведены исследования кварц-пиритовых участков на предмет наличия следов пластических деформаций при помощи метода дифракции отраженных электронов на микроскопе с вольфрамовым катодом. При выбранном режиме съемки достоверный минимальный размер разориентированных областей составляет 1...2 мкм при шаге сканирования три точки на рассматриваемой области. Аппроксимация границ разориентации, с учетом границ разбиения на области малоугловых границ $2...15^\circ$ и большеугловых границ $>15^\circ$, построение прямых полюсных фигур, фазовых карт, определение размеров зерен и статистических параметров распределения, производили при помощи программного обеспечения Channel5.

Пробы были отобраны с одной глубины, что позволяет говорить об одинаковом литостатическом давлении и, как следствие, напряжении. Были исследованы деформированные участки с разной объемной долей пирита. Следы пластической деформации были обнаружены в кварце. Наблюдается образование субграниц внутри материнского зерна. Чем меньше объемная доля пирита в исследованной кварц-пиритовой ассоциации, тем выше плотность деформационных границ в кварце. Таким образом, сдвиговое напряжение пласта будет определяться объемной долей пирита, чем она выше, тем выше сопротивление сдвигу. Так как пирит и кварц испытывают пластические деформации в одном диапазоне температур (выше 1000°C) и имеют близкий предел ползучести, то можно полагать, что преимущественная деформация кварца связана с его гидrolитическим ослаблением. В этом случае в кварце происходит гидролиз кремнекислородных связей и, как следствие, понижается температура, при которой начинаются пластические деформации. Увеличение содержания воды приводит к активизации плоскостей ромбоэдра и призмы, что подтверждает анализ полюсных фигур кварца. Активизация этих плоскостей говорит о низких температурах и низких скоростях деформации. Подобное явление характерное для силикатов и алюмосиликатов. Оно не наблюдается для пирита.

Исследования проводили с использованием оборудования центра коллективного пользования «Аналитический центр геохимии природных систем» НИ ТГУ.

DOI: 10.17223/9785946218412/424

О ВОЗМОЖНОСТИ УПРАВЛЕНИЯ ТЕХНОГЕННЫМИ ВОЗДЕЙСТВИЯМИ СЕЙСМООПАСНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ В ЗОНАХ АКТИВНЫХ ТЕКТОНИЧЕСКИХ РАЗЛОМОВ

¹Ружич В.В., ²Цсахье С.Г., ^{2,3}Шилько Е.В.

¹Институт земной коры СО РАН, Иркутск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

³Томский государственный университет, Томск

Начиная с 1999 года, ИЗК СО РАН совместно ИФПМ СО РАН осуществлялись комплексные систематические исследования, направленные на изучение механизмов сеймотектонической деструкции и разработку способов управления сеймотектоническими деформациями в сегментах сейсмоопасных разломов для безопасного снижения их избыточного сейсмического потенциала. Для решения поставленных задач использовались методы физического и численного моделирования процессов деформирования и динамического разрушения в природных разломно-блоковых средах различного типа – геологической и ледовой. Исследования проводились в рамках рабочих семинаров, совещаний и полевых экспедиций с организацией стационарных наблюдений, мониторинга естественных деформаций и сейсмичности, натурных экспериментов в зонах активных разломов Прибайкалья, Якутии, Монголии. В камеральные периоды осуществлялись обработка, анализ собранных материалов и численное моделирование управления деформациями средствами достижений в области физической мезомеханики с использованием собранных сведений в полевых экспедициях. Большое внимание уделялось созданию новой измерительной высокоточной аппаратуры для прецизионной регистрации деформаций и сейсмического излучения из разномасштабных разрывных нарушений в массивах горных пород.

Многолетние исследования проводились в зимние периоды и на ледовом покрове Байкала, имеющем многомасштабное блочное строение, где при термоактивированных деформациях происходят ледовые удары – мощные сейсмические импульсы с энергией, соответствующей слабым тектоническим землетрясениям [1] (рисунок 1). Было, в частности, установлено, что слабыми подледными взрывами и деформациями с применением мощных домкратов возможно инициировать ледовые удары или ослаблять их реальное проявление периодическими слабыми техногенными воздействиями, распределенными вдоль трещин.

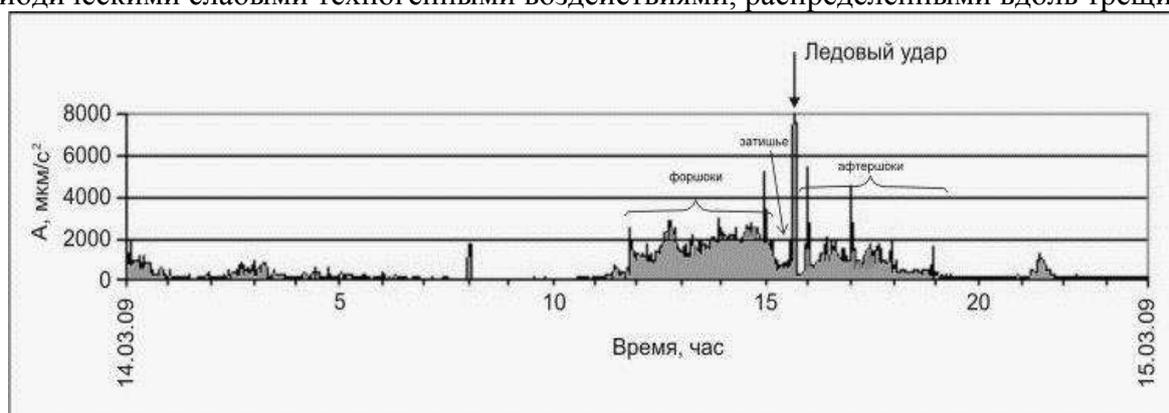


Рис. 1. Сейсмическая запись одного из ледовых ударов, сходных по реологическим параметрам со слабыми землетрясениями в Байкальской рифтовой впадине.

Значительные успехи были достигнуты в исследованиях разломных зон в горных массивах Прибайкалья, на территории Монголии и в сверхглубоком карьере в Республике Саха с применением взрывных и квазистатических силовых воздействий в сочетании с закачками воды в сегменты разломов. В качестве примера на рис.2. показан один из таких испытательных полигонов на участке Ангарского сейсмоактивного разлома вблизи поселка Листвянка Иркутской области. Результаты натурных испытаний на сегменте Ангарского разлома стали основой для получения патента о способе управляющего техногенного

воздействия на разломы с применением виброимпульсных воздействий и с закачками растворов в разлом [2].

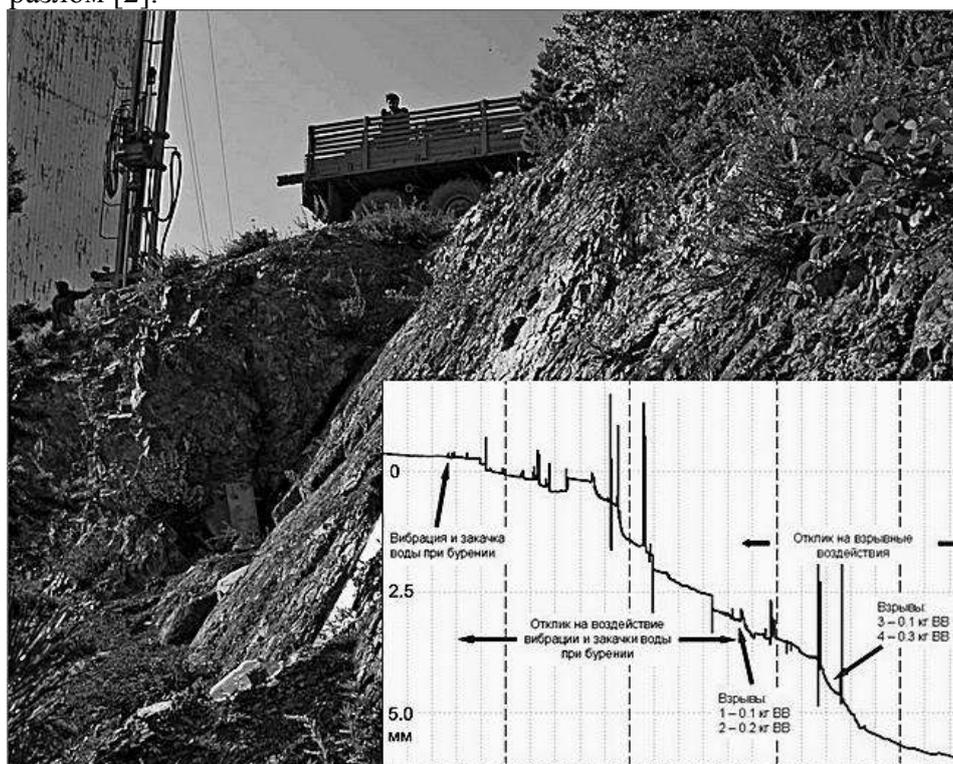


Рис.2. Бурение скважин на участке Ангарского разлома для проведения закачек водных растворов в зону сместителя разлома и проведение кумулятивных взрывов. На врезке представлен график смещений в зоне разлома после проведенных виброимпульсных воздействий, вызвавших ускоренные смещения с суммарной амплитудой до 8 мм в сочетании с серией значительных по амплитуде сейсмических импульсов. После проведения испытаний сейсмореформационная активность участка разлома значительно снизилась на многие годы.

Последующими многолетними фундаментальными исследованиями коллективов сотрудников двух институтов под руководством член-корреспондента РАН С.Г. Псахье, проводимых в течение 15 лет в разных регионах Восточной Сибири и Монголии, удалось многократно расширить и обосновать правомерность выбранного научного направления по созданию принципиально новых методических подходов к решению проблем обеспечения сейсмобезопасности путем проведения превентивных управляемых техногенных воздействий на выявленные потенциально опасные сегменты разломов [3]. Выбранное направление исследований остается в мировой науке пионерным до настоящего времени и находит все большее понимание и привлекает последователей не только в России, но и за рубежом [4].

1. Ruzhich, V.V.; Psakhie, S.G.; Chernykh, E.N.; Shilko, E.V.; Levina E.A.; Dimaki A.V. (2018) Baikal Ice Cover as a Representative Block Medium for Research in Lithospheric Geodynamics / Physical mesomechanics, V. 21/3, Pp. 223-233.
2. Псахье С.Г., Попов В.Л., Шилько Е.В., Астафуров С.В., Ружич В.В., Смекалин О.П., Борняков С.А. Способ управления режимом смещений во фрагментах сейсмоактивных тектонических разломов: пат. № 2273035 Рос. Федерация / Заявитель ИФПМ СО РАН, патентообладатели: ИФПМ СО РАН, ИЗК СО РАН. - № 2004108514/28(008997).
3. Ruzhich V. V., Psakhie S. G., Shilko E. V., Vakhromeev A. G., Levina E. A. On the Possibility of Development of the Technology for Managing Seismotectonic Displacements in Fault Zones // AIP Conference Proceedings. 2018. V. 2051, Iss. 1. Pp. 020261–1–4.
4. Savage, H. M., J. D. Kirkpatrick, J. J. Mori, E. E. Brodsky, W. L. Ellsworth, B. M. Carpenter, X. Chen, F. Cappa, and Ya. Kano. Scientific Exploration of Induced Seismicity and Stress (SEISMS). - Sci. Drill., 23, 57–63, 2017.

DOI: 10.17223/9785946218412/425

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ СЛАБЫХ СЕЙСМИЧЕСКИХ СОБЫТИЙ НА КОРОБКОВСКОМ МЕСТОРОЖДЕНИИ КУРСКОЙ МАГНИТНОЙ АНОМАЛИИ

Беседина А.Н.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт динамики геосфер имени академика М.А. Садовского
Российской академии наук, Москва*

Влияние экзогенных воздействий на деформационный режим разломной зоны, а, следовательно, и на процесс инициирования техногенно-тектонических землетрясений, наиболее отчетливо проявляется в виде слабой сейсмичности приуроченной к активному разлому. Данные о расположении очагов и их механизмах содержат сведения как о структуре и гетерогенности разлома [1, 2], так и о напряженно-деформированном состоянии [3].

В данной работе проведен анализ микросейсмичности, инициированной в процессе разработки Коробковского месторождения. Для этого были выбраны наиболее опасные участки смыкания Главной и Стретенской залежей, которые характеризуются как зоны тектонических нарушений общей мощностью около 100 м. Мониторинг сейсмических событий в этой области проводился периодически в течение года в дни проведения массовых взрывов [4]. Измерительная система, включающая акселерометры Briel&Kjaer 8306 (0.08 Гц-1 кГц) с частотой опроса 10 кГц, была установлена на вертикальной стенке выработки, на глубине около 300 м от свободной поверхности. Геометрия системы измерений представляла собой линейный профиль или систему крест. Выделение слабых сейсмических событий проводилось по методике, которая позволяет детектировать события в присутствии помех на разных частотах [4]. Для единой параметризации массовых взрывов по эпицентральному расстоянию и максимальному количеству взрывчатого вещества (ВВ) в одной ступени рассчитывалась максимальная скорость смещения грунта, которая составила 0.37-96.59 мм/с для взрывов на расстоянии 125-2400 м от измерительной точки и максимальном количестве ВВ в одной ступени 522-1435 кг.

Для решения поставленных задач разработана методика классификации слабых сейсмических событий по механизму очага. Параметры сейсмических событий, для которых развитие разрыва описывается моделью сдвиговой трещины проведено с помощью решения обратной задачи для модели Дж. Брюна [5]. Для выделенных событий угловая частота составила 80-1000 Гц, что, согласно модели, соответствует 7-10 порядку сейсмического момента или моментной магнитуде -1.3...1. Параметризация событий, которые описываются трещиной отрыва, проводилась как при исследовании спектрального состава, так и при анализе кинематических параметров событий (параметры нарастания сейсмических импульсов).

Проведено исследование относительных вариаций во времени жесткости разломной зоны и групповой скорости сейсмических волн во времени. Мониторинг вариаций скорости вблизи разломной зоны с помощью кросс-корреляция сейсмических шумов может позволить проследить изменение напряженно-деформированного состояния массива горных пород. Отработка и адаптация метода для проведения измерений на малых базах в диапазоне высоких частот была проведена в [6]. Полученные значения жесткости области дезинтеграции центральной зоны разлома находятся в хорошем соответствии с зависимостью жесткости разлома от масштаба по мировым данным. Например, для разломов длиной около 3-4 км характерные средние значения нормальной и сдвиговой жесткости составляют 600 МПа/м и 150 МПа/м соответственно [7]. Результаты длительного мониторинга вариаций скорости с помощью кросс-корреляции шумов зарекомендовали себя при определении физических механизмов деформирования разломной зоны.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект № 16-17-00095).

2. Goebel T.H.W., Becker T.W., Schorlemmer D., Stanhitz S., Sammis C., Rybacki E., Dresen G. Identifying fault heterogeneity through mapping spatial anomalies in acoustic emission statistics // *J. Geophys. Res.* 2012. N. 117. P. B03310.
3. Liu J., Xu S., Li Y. and Lei G., *Rock Mech. Rock Eng.* (2018). <https://doi.org/10.1007/s00603-018-1541-y>.
4. Besedina A.N., Kishkina S.B., Pavlov D.V. Reaction of the fault zone to periodic seismic impact by example of the Korobkovo ore deposit // *AIP Conference Proceedings*. 2018. N. 2051. P. 020028, doi: 10.1063/1.5083271.
5. Madariaga R. Earthquake scaling laws // *Extreme Environmental Events: Complexity in Forecasting and Early Warning*. Robert A. Meyers ed. Springer. 2010. P. 364-381.
6. Besedina A.N., Ostapchuk A.A. Microseismic ambient noise analysis for estimation of the deformation characteristics of a fault zone // *AIP Conference Proceedings*. 2018. N. 2051. P. 020029, doi: 10.1063/1.5083272.
7. Кочарян Г.Г. Геомеханика разломов. М.: ГЕОС, 2016, 424 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/426

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОДГОТОВКИ СЕЙСМИЧЕСКИХ СОБЫТИЙ С ПОМОЩЬЮ АНАЛИЗА НИЗКОЧАСТОТНОГО СЕЙСМИЧЕСКОГО ШУМА

Беседина А.Н., Ряховский И.А., Павлов Д.В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт динамики геосфер имени академика М.А. Садовского
Российской академии наук, Москва*

В последнее десятилетие сформировалась гипотеза о том, что при переходе очаговой области будущего землетрясения в метастабильное состояние механические характеристики разломной зоны должны заметно изменяться, а в последние годы эта гипотеза была подтверждена и экспериментально [1, 2]. Если этот эффект имеет место в природных условиях, то может существовать возможность инструментального контроля изменений напряженно-деформированного состояния разломной зоны на заключительной стадии подготовки землетрясения. Эти изменения могут быть обнаружены, в частности, при анализе параметров низкочастотного микросейсмического шума.

В работе проведен анализ микросейсмического фона в диапазоне низких частот за десятилетний период для Чилийского региона. Для анализа были привлечены данные сейсмических станций LCO, LVC и TRQA международной сейсмической сети IRIS (<http://ds.iris.edu/ds/nodes/dmc/forms/breqfast-request/>). Выборка землетрясений и их основных параметров проводилась по данным сейсмического каталога USGS Earthquake catalog (<https://earthquake.usgs.gov/earthquakes/search/>). Для количественной характеристики микросейсмического фона и оценки характерной частоты собственных колебаний был использован алгоритм центра масс. Проводилась оценка спектрального центроида, который указывает где, главным образом, сосредоточена энергия колебаний. Помимо долгосрочного анализа микросейсмического фона, проводилось исследование результатов регистрации микросейсм до и после крупных удаленных землетрясений. В ходе исследования параметров сейсмического фона выделены землетрясения, перед которыми наблюдается понижение спектральной частоты. В целом, минимальное значение спектрального центроида перед землетрясениями с $M > 8$ согласуется с теоретическими значениями частот собственных колебаний, полученных для модели колебаний блока на пружине [3]. Для событий с $7 < M < 8$ накоплена малая статистика, поскольку эпицентральные расстояния до регистрируемых станций зачастую больше размеров очага регистрируемых землетрясений. Для событий с $6 < M < 7$ ожидаемые значения спектрального центроида совпадают с характерными частотами первичных и вторичных микросейсм.

Поиск собственных частот колебаний блоков, которые могут быть обнаружены в спектре сейсмических шумов, проводился и на меньшем иерархическом уровне. Для анализа были привлечены данные записи высокочастотных акселерометров на глубине ~ 300 км от свободной поверхности в районе г. Губкин, где ведётся разработка залежей железной руды и регулярно проводятся взрывные работы. Меньшая, по сравнению с крупными землетрясениями, длина волны, возникающая при массовых взрывах, позволит провести исследование на меньшем масштабе. Однако повышенный уровень сейсмического фона вблизи участков ведения горных работ создает трудности обработки и требует адаптации методики выделения и идентификации нестационарных событий низкочастотного микросейсмического шума.

Проведение измерений выполнено в рамках государственного задания (проект № 0146-2019-0006). Обработка и анализ сейсмических данных выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-05-00923).

1. Кочарян Г.Г., Остапчук А.А., Павлов Д.В., Будков А.М. О перспективе обнаружения процесса подготовки землетрясения в спектре сейсмического шума. Лабораторный эксперимент // Физика Земли. 2018. № 6. С. 117-129.
2. Kocharyan G.G., Ostapchuk A.A., Pavlov D.V. Traces Of Laboratory Earthquake Nucleation In The Spectrum Of Ambient Noise // Scientific Reports. 2018. N. 8. P. 10764, <https://doi.org/10.1038/s41598-018-28976-9>.
3. Besedina A.N., Ostapchuk A.A. Parametric analysis of the low-frequency seismic noise as the basis for monitoring changes of the stress-strain state of rock // AIP Conference Proceedings. 2018. N. 2051. P. 020030, doi: 10.1063/1.5083273.

DOI: 10.17223/9785946218412/427

**РЕЖИМ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ВОДОНАСЫЩЕННОГО КОЛЛЕКТОРА ПО
ДАНЫМ ПРЕЦИЗИОННОГО МОНИТОРИНГА УРОВНЯ ПОДЗЕМНЫХ ВОД**

Кабыченко Н.В., Горбунова Э.М., Беседина А.Н.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт динамики геосфер
им. М.А. Садовского Российской академии наук, Москва*

Приливной анализ широко используется для оценки фильтрационных свойств водонасыщенного коллектора – водопроницаемости и проницаемости и основан на исследовании фазового сдвига между приливными волнами, выделенными в вариациях уровня водоносных горизонтов и объемной деформацией пласта. Основные результаты исследований в этом направлении отражены в многочисленных работах Hsieh et al., 1987; Doan et al., 2006; Cutillo, Bredehoeft, 2011; Burbey et al., 2012; Lai, Wang, 2013; Vinogradov et al., 2017; Барабанов и др., 1988; Багмет и др., 1989; Любушин и др., 1993; Копылова и др., 2009; Беседина и др., 2015 и др.

В статье [1] обоснована информативность долговременных высокоточных измерений уровня при исследовании зон разломов по сравнению с результатами обработки данных последовательно проведенных откачек. Приливной анализ позволяет дистанционно определять низкие значения проницаемости коллектора *in situ*, которые невозможно оценить, используя традиционные методы гидрогеологического опробования. Амплитуды суточных и полусуточных приливных волн в вариациях уровня могут зависеть от раскрытия (апертуры) трещин, ориентации (падения и простирания), протяженности трещин и сжимаемости шероховатостей [2]. Соотношение теоретических значений амплитуд основных типов волн объемной деформации пород по составляющим С – Ю и В – З различается с учетом широты расположения пункта измерений [3]. Вариации уровня напорного водоносного горизонта рассматриваются в качестве одного из индикаторов пороупругого отклика водонасыщенного коллектора на земные приливы.

Целью настоящей работы явилось исследование приливного отклика, соответствующего разным типам волн, выделенным в уровне напорного водоносного горизонта по данным прецизионного мониторинга уровня подземных вод, проводимого на территории геофизической обсерватории ИДГ РАН «Михнево» [4]. Водовмещающие породы представлены карбонатным коллектором трещинно-порового типа (известняками, доломитами с подчиненными прослоями глин). Были рассмотрены ежемесячные ряды гидрогеологических данных за период 2017 - 2018 гг. за исключением результатов измерений, проведенных в марте 2018 г. из-за технических помех, осложняющих регистрацию сигнала.

К обработке выбранного ряда гидрогеологических наблюдений применена новая методика, которая позволила четко выделить приливные волны в уровне подземных вод. Были определены среднемесячные значения амплитуд для восьми типов приливных волн, включая 4 полусуточных – K_2 , S_2 , M_2 , N_2 и 4 суточных - K_1 , P_1 , O_1 и Q_1 . Объемная деформация пород рассчитана с использованием программного пакета ETERNA 3.0 [5] применительно к координатам наблюдательной скважины.

Режим напорного водоносного горизонта подвержен сезонным вариациям. Увеличение напора за период наблюдений составило 3.3 м. С июня 2018 г. прослежен устойчивый тренд снижения уровня на 1.4 м, который может быть связан с влиянием региональной воронки депрессии, сформированной в пределах Московского региона. Таким образом, в пределах рассматриваемого ряда наблюдений выделяются участки естественного и техногенно-нарушенного режима подземных вод, которые характеризуются изменением параметров подземного потока – направления, уклона и скорости движения. Соответственно в естественных и техногенно-нарушенных гидрогеологических условиях, как при подъеме, так и при снижении уровня напорного горизонта к магистральным – основным водопроницающим трещинам относятся системы гидрогеологически активных трещин разных направлений.

В связи с вышесказанным сравнительный анализ значений амплитуд приливных волн, выделенных в уровне подземных вод по экспериментальным данным и рассчитанных для объемной деформации пород, выполнялся поэтапно. В первую очередь была выполнена оценка амплитудного фактора по углу наклона линейной зависимости между среднемесячными значениями амплитуд приливов в уровне и теоретической деформации пород. Устойчивая взаимосвязь отмечена в мае 2017 г. и 2018 г. по сравнению с остальными месяцами наблюдений (см. рис. 1).

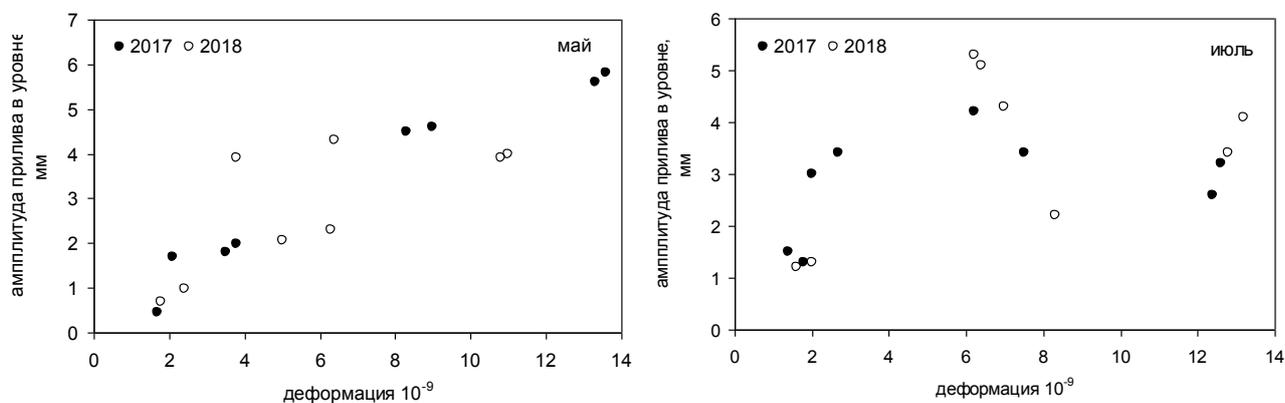


Рис. 1. Амплитудный фактор напорного водоносного горизонта за май и июль 2017 г. и 2018 г.

На следующем этапе был исследован амплитудный фактор для каждого типа приливных волн за двухлетний период наблюдений. Пороупругий отклик на деформирование коллектора наиболее выражен для приливных волн лунного типа N_2 и главной солнечной волны P_1 . Далее среди основных типов приливных волн было рассмотрено помесечное соотношение амплитуд отклика, выделенных в уровне напорного горизонта и рассчитанных для объемной деформации. Для главной суточной волны O_1 , начиная с июля 2018 г., прослежено увеличение амплитуды гидрогеологического отклика на фоне уменьшения амплитуды, теоретически рассчитанной деформации за исключением октября и ноября 2018 г. Подобное расхождение значений амплитуд откликов в уровне и деформации частично отмечено и для полусуточной волны лунного типа N_2 .

Полученные результаты позволяют предположить, что различия в соотношении интенсивности отдельных приливных волн, выделенных в уровне напорного водоносного горизонта, может косвенно свидетельствовать об изменении направления магистрального движения воды на микроуровне по системам водопроводящих трещин. Планируется продолжить работы по прослеживанию взаимосвязи между вариациями амплитуд различных типов приливных волн.

Работа выполнена в рамках госзадания АААА-А17-117112350020-9 и при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-05-00809).

1. Allegre V., Brodsky E., Xue L., Nale S.M., Parker B.L., Cherry J.A. Using earth-tide induced water pressure changes to measure in situ permeability: A comparison with long-term pumping tests // *Water Resources Research*. 2016. 52.
2. Bower D. R. Bedrock fracture parameters from the interpretation of well tides // *Journal of geophysical research*. Vol.88. No. B6. June 10. 1983. P.5025-5035.
3. Мельхиор П. Земные приливы. М.: Мир. 1968. 483 с.
4. Беседина А.Н., Виноградов Е.А., Горбунова Э.М., Кабыченко Н.В., Свинцов И.С., Пигулевский П.И., Свистун В.К., Щербина С.В. Отклик флюидонасыщенных коллекторов на лунно-солнечные приливы. Часть 1. Фоновые параметры приливных компонент в смещении грунта и уровне подземных вод // *Физика Земли*. 2015. № 1. С.73-82.
5. Wenzel H.G. Earth tide analysis package ETERNA 3.0 // *BIM*. 1994. № 118. P. 8719-8721.

DOI: 10.17223/9785946218412/428

**АВТОСОЛИТОННАЯ КОНЦЕПЦИЯ МЕДЛЕННЫХ
ДЕФОРМАЦИОННЫХ ВОЛН В ЗЕМЛЕ**

^{1,2}Макаров П.В.

¹*Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

К настоящему времени в геодинатике на основе почти пятидесятилетних наблюдений за процессами миграции геофизических полей и миграций сейсмических активизаций сформировалась концепция медленных деформационных волн Земли. Эти медленные движения распространяются в геосредах со скоростями на 5-7 порядков меньшими, чем скорости звука. Стало также понятно, что подобная медленная динамика нагруженной геосреды является важнейшей частью общего процесса эволюции напряженно-деформированного состояния геосреды как типичной нелинейной динамической системы. Следующий этап становления концепции деформационных волн Земли связан с синергетическим взглядом на их физическую природу. Медленные деформационные возбуждения стали рассматривать как автоволновые процессы, развивающиеся в нагруженной т.е. активной среде.

В представляемом сообщении предлагается общая модель, описывающая процесс совместной генерации и распространения в нагружаемой прочной среде как обычных волн напряжений, распространяющихся со скоростями звука, так и медленных автоволновых возмущений неупругой природы, скорости распространения которых на много порядков ниже скоростей звука. Изучение параметров и свойств медленных деформационных возмущений выявило их автосолитонную природу. Полученные решения показали, что в нагружаемой прочной среде формируются три типа автосолитонов: 1) статические; 2) пульсирующие; 3) бегущие.

Причем, при определенных условиях бегущие автосолитоны взаимодействуют как не вполне упругие частицы, отталкиваются либо сливаются со статическими, формируя в прочной упругопластической среде диссипативные структуры – полосы локализованной деформации.

Полученные результаты позволили сформулировать автосолитонную концепцию медленных деформационных волн в Земле и процессов формирования в геосредах диссипативных структур, к которым следует отнести разломы.

DOI: 10.17223/9785946218412/429

АВТОСОЛИТОНЫ В ГЕОСРЕДАХ

^{1,2}Макаров П.В., ²Перышкин А.Ю.

¹*Томский государственный университет, Томск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

В работе численно изучены процессы распространения автосолитонных возмущений в геосредах. Исследованы как особенности распространения медленных деформационных возмущений по разломам, так и межразломные автоволновые процессы. Изучены процессы формирования в нагруженной прочной среде волн переключения, обычных автоволн и бегущих автосолитонов неупругой природы. Показано, что при встрече двух бегущих автосолитонов они взаимодействуют как не вполне упругие частицы, отталкиваясь друг от друга. Также показано, что цуги бегущих автосолитонов при взаимодействии со стационарным, либо пульсирующим автосолитоном сливаются с ним образуя более мощную стационарную динамическую структуру.

Таким образом, численно воспроизведен процесс формирования разломов в активной нагружаемой геосреде.

DOI: 10.17223/9785946218412/430

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОТЕКТОНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ТЕРРИТОРИИ СИБИРСКОЙ ПЛАТФОРМЫ И ЕЁ ОБРАМЛЕНИЯ^{1,2}Ахметов А.Ж., ^{1,2}Смолин И.Ю., ^{1,2}Макаров П.В. ²Перышкин А.Ю.¹*Томский государственный университет, Томск*²*Институт физики прочности и проектирования СО РАН, Томск*

По геологическим данным Енисейский кряж и Якутско-Виллюйская изверженная провинция, которые находятся на территории Сибирской платформы, существенно различаются как по геологии, так и по развитию в них тектонических процессов. Если в области Енисейского кряжа преобладают деформации сжатий-сдвигов ввиду наличия Приенисейского сдвиго-надвигового пояса, то в Якутско-Виллюйской изверженной провинции ярко выражены растяжения-сдвиги, обусловленные, в том числе, и вулканизмом [1,2].

В работе выполнено моделирование геотектонических течений в этих областях с учётом особенностей их структурного строения. Проведена оценка вида напряженно-деформированного состояния (НДС) в этих областях на основе расчётов глобальных тектонических течений в Центральной Азии как результата процесса коллизии на границах Евразийской плиты (Индостан, Аравия на юге, Североамериканская плита на северо-востоке). Также выполнен расчёт локальных современных тектонических течений этих регионов, обусловленных особенностями их геологического строения.

В математической постановке были использованы основные уравнения механики деформируемого твёрдого тела и определяющие соотношения упругопластической среды с неассоциированной моделью Друкера-Прагера-Николаевского [3,4]. Компьютерное моделирование было проведено с помощью конечно-разностного метода Уилкинса [5]. В уравнение состояния системы не были внесены тепловые параметры, влияющие на характер напряженно-деформированного состояния, поэтому был проведён лишь учёт геотектонических преобразований, возникших в результате процесса коллизии на территории Енисейского Кряжа и процесса растяжения в Якутско-Виллюйской изверженной провинции. Граничные условия представлены в качестве боковых смещений, которые параллельно возникают с влиянием силы тяжести, выраженным ускорением свободного падения.

Для более подробного исследования вида НДС Енисейского кряжа были проведены расчёты для геологических разрезов вдоль профилей «Батолит-1982» и «Шпат», на основе данных ГСЗ, полученные центром ГЕОН [6]. Полученные результаты показали наличие областей локализованной неупругой деформации в районе надвига Приенисейского сдвиго-надвигового пояса. Также в обоих профилях полосы локализованной неупругой деформации распространяются на поверхность горного массива именно в области нахождения сибирских рек Енисей и Вельмо. Максимальные значения отрицательных горизонтальных напряжений сосредоточены в области границы Мохо. На общую картину напряженного состояния в обоих профилях существенно влияют неоднородность физико-механических свойств и кривизна слоёв земной коры. В Якутско-Виллюйской изверженной провинции выявлены заметные растяжения-сдвиги, обусловленные их геологическим строением и особенностями регионального вида НДС.

Данное научное исследование выполнено в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы, направление III.23, а также в рамках проекта № 53 “Численное моделирование плавления в земной коре и литосфере при растяжении и коллизии (на примере Сибирской платформы и её обрамления)” Комплексной программы фундаментальных исследований СО РАН “Междисциплинарные интеграционные исследования на 2018–2020 гг”.

1. Vernikovskiy, V.A., Metelkin D.V., Vernikovskaya, A.E., Matushkin, N.Yu., Kazansky, A.Yu., Kadilnikov, P.I., Romanova, I.V., Wingate, M.T.D., Larionov, A.N., Rodionov, N.V. Neoproterozoic tectonic structure of the Yenisei Ridge and formation of the western margin of the Siberian craton based on new geological, paleomagnetic, and geochronological data // Russian Geology and Geophysics. 2016. №52. P. 24–39. DOI: 10.1016/j.rgg.2010.12.003

Секция 9. Иерархическая организация объектов в геодинамике

2. Polyansky O.P., Prokopiev A.V., Koroleva O.V., Tomshin M.D., Reverdatto V.V., Selyatitsky A.Yu., Travin A.V., Vasiliev D.A. Temporal correlation between dyke swarms and crustal extension in the middle Palaeozoic Vilyui rift basin, Siberian platform // *Lithos*. 2017. v. 282-283, P. 45-64. dx.doi.org/10.1016/j.lithos.2017.02.020.
3. Нелинейная механика геоматериалов и геосред. // Под ред. Л.В. Зуева. Н.: Академическое изд-во «Гео», 2007. 235с.
4. Николаевский В. Н. Механические свойства грунтов и теория пластичности // *Механика твёрдых деформируемых тел*. Т. 6. Итоги науки и техники. М.:ВИНИТИ АН СССР, 1972. С.5 – 85
5. Уилкинс М. Л. Расчет упругопластических течений // *Вычислительные методы в гидродинамике*. – М.: Мир, 1967. С. 212 – 263.
6. Костюченко С.Л., Мухин А.В., Кадурын И.Н., Неядько В.В., Ракитов В.А., Чернышев Ю.Г. К 50-летию юбилею деятельности центра ГЕОН // *Разведка и охрана недр*. 2018 №02. С.28 – 37

DOI: 10.17223/9785946218412/431

ЭТАПЫ ФОРМИРОВАНИЯ РАЗЛОМНОЙ ЗОНЫ ПРИ СДВИГЕ ПО ПРОСТИРАНИЮ. КИНЕМАТИКА БЛОЧНОЙ СТРУКТУРЫ

^{1,2}Бакеев Р.А., ^{2,1}Стефанов Ю.П., ³Кочарян Г.Г.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, Новосибирск*

³*Институт динамики геосфер РАН, Москва*

Скорость деформации, а соответственно и смещений по разрыву, зависит от скорости разупрочнения в результате накопления повреждений и снижения сцепления, а также величины и закона изменения трения. При этом величина смещения определяется протяженностью разрыва, накопленной энергией и внешними условиями. Таким образом, динамические явления связанные как с формированием, так и развитием разрыва зависят от множества факторов, в число которых входит строение и этап эволюции разломной зоны.

В работе представлены результаты численного исследования формирования магистрального разлома и оперяющих разломных структур в осадочном чехле в условиях продольного сдвига блоков фундамента (strike-slip). Показано, что можно выделить несколько этапов формирования и развития разрыва, на каждом из которых последовательно формируются отдельные зоны нарушений. Начальные этапы характеризуются наиболее плавным развитием деформации, в ходе чего происходит зарождение множества нарушений в вершине разлома в основании осадочного чехла, а также формированием полос локализации в поверхностных слоях. По мере увеличения смещения происходит рост оперяющих структур от вершины разреза в основании к поверхности. На следующем этапе происходит дальнейшее смещение блоков геосреды вдоль оперяющих нарушений, их скорость существенно возрастает в момент выхода сколов на поверхность. Форма оперяющих нарушений и магистрального разлома определяется как начальным напряженным состоянием, так и упругопластическими свойствами среды. Заключительной стадией является замыкание разломов верхней и нижней частей по всей высоте и формирование магистрального разлома. Относительное смещение блоков вдоль оперяющих нарушений прекращается, и массивы по разные стороны от разлома движутся как целое.

Моделирование осуществлялось в трёхмерной постановке, решалась система уравнений динамики упруго-хрупкопластической среды. Неупругое поведение среды описывалось в рамках модифицированной модели Друккера-Прагера-Николаевского с неассоциированным законом течения.

Данное научное исследование выполнено в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23, и при поддержке РФФИ, грант №19-05-00378.

DOI: 10.17223/9785946218412/432

РАСЧЕТ ГРАВИТАЦИОННЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В СЛОЕ ГЕОСРЕДЫ

^{1,2}Бакеев Р.А., ^{2,1}Стефанов Ю.П.,

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

²*Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, Новосибирск*

Определение напряженно-деформированного состояния, вызванного силой тяжести, является начальным этапом в решении многих задач геомеханики, как фундаментальных – моделирование движения тектонических плит, развитие разломов, так и прикладных, связанных с бурением скважин, горными выработками, строительством.

Применение традиционного подхода в рамках динамической модели, основанного на плавном наращивании силы тяжести, приводит к тому, что среда сжимается вдоль вертикальной оси. В результате такой усадки мы получим распределение напряжений в деформированной среде с искаженным рельефом и внутренней структурой, не соответствующими первоначально заданным. Легко оценить, что при толщине модели в десятки километров даже в упругом состоянии искажения геометрии будут значительны. При пластической деформации искажения могут быть значительно больше. Таким образом, возникает серьезная проблема расчета напряженного состояния соответствующего заданным структуре и рельефу, например, горной системы.

В представленной работе предложен алгоритм расчета напряженного состояния моделируемой области геосреды в поле силы тяжести с сохранением заданного рельефа поверхности и геометрии неоднородностей. Разработанный алгоритм апробирован для упругого и упругопластического поведения среды. В качестве примеров приведены решения одно, двух и трехмерных задач определения напряженно-деформированного состояния в слое геосреды. Приведены решения как однородных сред и для сред со структурой – модель горы, солевые диапиры. Результаты расчетов показали, что применение разработанного алгоритма обеспечило сохранение рельефа и структуры или их минимальные искажения по сравнению с традиционным подходом расчета начального напряженного состояния, обусловленного действием силы тяжести.

Данное научное исследование выполнено в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23 и IX.128.1.1.

DOI: 10.17223/9785946218412/433

**УЧЕТ СФЕРИЧНОСТИ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ
ДЕФОРМАЦИИ В ЗЕМНОЙ КОРЕ**

^{1,2}Стефанов Ю.П., ^{2,1}Бакеев Р.А., ¹Суворов В.Д., ¹Мельник Е.А.

¹*Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, Новосибирск*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

В основе численного расчета напряженно-деформированного состояния в геологических средах лежат методы, разработанные в механике сплошной среды. Однако при решении задач геомеханики возникает ряд специфических проблем, связанных с большими размерами исследуемых областей, недостатком сведений о свойствах среды и условиях деформирования. Остается открытым вопрос о влиянии и необходимости учета сферичности при рассмотрении процессов деформации для областей разной протяженности и глубины.

Для решения этой задачи была проведена адаптация численного алгоритма решения краевой задачи в рамках шаблона, построенного для декартовой системы координат. Построена цилиндрическая расчетная сетка, учтено изменение вектора силы тяжести, существенно переработан расчет граничных условий на случай произвольных криволинейных границы, что позволило без введения цилиндрической системы координат, учесть кривизну границы.

В качестве примера рассмотрена задача о напряженно-деформированном состоянии трёхслойной блочной модели земной коры и верхов мантии, вдоль профиля Тарим–Алтай протяженностью 2500 км и глубиной 90 км. Результаты расчетов показали, что применение разработанного алгоритма расчета гравитационных напряжений обеспечило сохранение рельефа после расчета начального напряженного состояния, обусловленного действием силы тяжести. На втором этапе расчета рассмотрено влияние тектонического сжатия на изменение напряженно-деформированного состояния, рост горных систем и формы границы Мохо. Проведено сравнение решений, полученных с учетом сферичности и для прямоугольной области. Показано заметное влияние учета сферичности на напряженно-деформированное состояние.

Моделирование процессов деформации выполнено для условий плоской деформации. Решалась система уравнений динамики упругопластической среды. Описание деформации за пределом упругости осуществлялось в рамках модифицированной модели Друккера–Прагера–Николаевского.

Данное научное исследование выполнено в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направления III.23 и IX.128.1.1.

DOI: 10.17223/9785946218412/434

ОСОБЕННОСТИ РАЗВИТИЯ РЕЛЬЕФА СКЛАДЧАТО-НАДВИГОВЫХ ПОЯСОВ

¹Татаурова А.А., ^{1,2}Стефанов Ю.П.¹Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, Новосибирск²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Одной из основных моделей нагружения среды складчато-надвиговых поясов является модель «бульдозера» [1]. Ее суть сводится к тому, что осадочная толща в виде клина, залегающая на жестком фундаменте, сжимается в результате смещения стенки в тыловой части слоя (см. рис.1). Вследствие этого происходит утолщение и изменение рельефа клина. Устойчивое состояние такой клин достигает в случае, когда сумма углов наклона дневной поверхности и фундамента достигают критической величины, определяемой теорией критического клина [1]. В этом случае деформация осадочной толщи ограничивается скольжением по плоскости срыва вдоль фундамента. Величина критического угла определяется углом внутреннего трения породы и трением на фундаменте.

Данная теория используется в многочисленных работах для оценки величины наклона рельефа. Она подтверждается физическими экспериментами [2], а также соответствует ряду геологических объектов, например, складчато-надвиговым поясам Тайвани, Барбадоса [3] и др. В то же время, ряд работ свидетельствуют о том, что в условиях нагружения по схеме модели «бульдозера» угол наклона дневной поверхности не соответствует теории критического клина [4]. В работе [4] показано, что угол наклона дневной поверхности в случае применения модели «бульдозера» для эксперимента с песком изменяется в диапазоне $\sim 10^\circ$ в зависимости от величины смещения задней стенки и превышает теоретическое значение более чем в два раза. Таким образом остаются вопросы, связанные с применимостью теории критического клина для описания формирования рельефа дневной поверхности предгорья для условий, соответствующих модели «бульдозера».

В представленной работе проведено численное моделирование деформирования клиновидного слоя при условиях нагружения, соответствующих модели «бульдозера» и выполнен сравнительный анализ полученных результатов с данными экспериментов на сыпучих средах [4] и теоретическими оценками модели [1]. Сопоставлялись параметры, характеризующие геометрию деформированного слоя. Для этого решалась задача о деформировании усеченной модели клина (см. рис.1) в упругопластической постановке. Были рассмотрены две модели: в первом случае величина базального трения (μ_b) (трения на фундаменте) была постоянной, а во втором – трение являлось функцией от интенсивности пластической деформации [5].

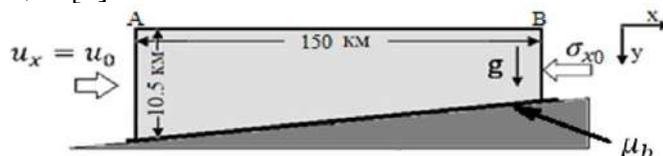


Рис. 1 Модель среды для используемая для численного эксперимента с граничными условиями

Согласно теории критического клина, при коэффициенте внутреннего трения и базальном трении $\mu_b=0.1$ наклон дневной поверхности должен быть равен $\alpha=3.4^\circ$. Средняя величина наклона поверхности, полученная при численном моделировании, составила $\alpha\sim 3.3^\circ$ (см. рис.2а). Однако данная теория не позволяет рассчитать наклон дневной поверхности при изменяющемся в процессе деформации трении. В этом случае можно оценить лишь верхний предел наклона дневной поверхности при максимальном значении трения. Так, при $\mu_b=0.3$ наклон будет 11° . По результатам численного моделирования было выделено два участка с разными углами наклона рельефа. В тыловой части он пологий, не более 1° , в то время как во фронтальной части, над зоной изменения трения, где наиболее интенсивно развивается необратимая деформации угол наклона составил примерно 6.2° . Полученное различие в 4.8°

является следствием понижения трения на основании в процессе деформации. Кроме того, определенный вклад в формировании рельефа вносит еще один параметр прочности – когезия.

Результаты численных расчетов для обоих рассматриваемых вариантов показали, что величина угла наклона дневной поверхности увеличивается с ростом смещения задней стенки, но спустя некоторое время достигает стабильное значение с погрешностью, не превышающей $\pm 1.5^\circ$. При постоянном трении горные структуры описываются единым наклоном рельефа. Результаты по данным физического эксперимента [4] показывают, что рост гор вследствие утолщения осадочного слоя пропорциональны корню из смещения тыловой границы умноженные на нормировочный коэффициент. Однако результаты расчетов показали более сложную зависимость роста гор от смещения в результате утолщения деформируемого слоя (см. рис.2б).

Для второго случая, когда трение снижалось с ростом необратимой деформации, выделяются участки с разным наклоном поднятия. Первый участок пологий, он формируется в тыловой части и для него характерен медленный прирост высоты, соответствующий низкому трению. Второй участок более крутой, он располагается во фронтальной части поднятия, где происходит рост гор, идет развитие процесса необратимой деформации, а в основании изменяется трение.

На рис. 2в показан график протяженности горного сооружения в зависимости от смещения боковой стенки. При постоянном трении на графиках рельефа трудно выделить связь с деформационными структурами, которые формируются в процессе деформации толщи. В то время как для модели с понижающимся трением каждая разломная структура проявляется в рельефе поверхности. Выходу каждого разлома на поверхность соответствует ступенька на графике рельефа. Такой вид рельефа согласуется с данными физических экспериментов [4], но общая форма графика плохо соответствует кривой выведенной из результатов физического эксперимента. В тоже время данные с постоянным трением более хорошо согласуются с функцией квадратичного корня от смещения. Тем не менее, полученные графики дают возможность предполагать дальнейшее развитие горных структур в зависимости от смещения границы области.

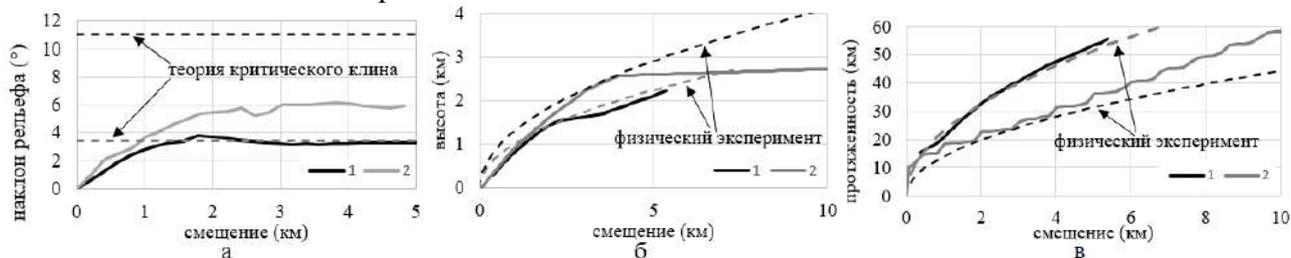


Рис.2 Именные рельефа в зависимости от смещения боковой стенки. а) наклон рельефа; б) изменение высоты рельефа вблизи тыловой стенки; в) протяженность горного сооружения. 1 – постоянное трение; 2 – понижающиеся в процессе деформации трение.

1. Davies D., Suppe J., Dahlen F. Mechanics of fold-and-thrust belt and accretionary wedges // J. Geophys. Res. 1983. № 88(B2). С. 1153–1172.
2. Dahlen F. Critical taper model of fold-and-thrust belts and accretionary wedges // Annu. Rev. Earth Planet. Sci. 1990. №18. С. 55–99.
3. Suppe J. Absolute fault and crustal strength from wedge tapers // Geology. 2007. № 35(12). С. 1127–1130.
4. Hofmann F., Rosenau M., Schreues G. Critical taper is sandbox experiments? Investigations into the differences between pushed and pulled wedge experiments International Geological Modeling Conference GeoMod 2010. URL: <http://geomod2010.fc.ul.pt/abstracts/Hofmann%20et%20al.pdf>.
5. Стефанов Ю.П., Татаурова А.А. Влияние трения и прочностных свойств среды на формирование зон локализации деформации в надвиговых структурах// Физическая мезомеханика. 2018. Т. 21. № 5. С. 46-55.

DOI: 10.17223/9785946218412/435

**ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОЙ ИЕРАРХИИ И ПЕРВОНАЧАЛЬНОЙ АНИЗОТРОПИИ
НА НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ ГЕОКОНСТРУКЦИЙ**

^{1,2}Чанышев А.И., ¹Абдулин И.М., ¹Белоусова О.Е.

¹*Институт горного дела СО РАН, Россия*

²*Новосибирский Государственный Университет Экономики и Управления, Россия*

При анализе прочности тех или иных геоконструкций необходимо учитывать строение материалов, в первую очередь первоначальную анизотропию и структурную иерархию. В данной работе производится анализ влияния блочности (размеров блоков, соотношения жесткости блоков и межблочного пространства, количества блоков на единицу длины) на характер напряженно-деформированного состояния массива пород вокруг выработок цилиндрической и сферической форм. Рассматриваются состояния упругости и пластичности, запредельного деформирования. Определяются напряжения, деформации, смещения, строятся соответствующие диаграммы изменения этих величин от параметров блочности. Также производится анализ влияния первоначальной анизотропии массива горных пород на величину предельной нагрузки при внедрении клиновидного инструмента в полупространство на заданную глубину. Устанавливается характер влияния параметров анизотропии на процесс внедрения инструмента.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-05-00757).

DOI: 10.17223/9785946218412/436

АДСОРБЦИЯ ГЕМОСТАТИЧЕСКОГО СРЕДСТВА НАНОЛИСТАМИ AlOOH И $\text{Fe}(\text{OH})_2$: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА¹Цуканов А.А., ²Мамонова Е.В., ²Гаврилова Л.О., ³Садовой М.А.¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия²Инновационный медико-технологический центр

(Медицинский технопарк), Новосибирск, Россия

³Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Новосибирский государственный медицинский университет" Министерства здравоохранения Российской Федерации, Новосибирск, Россия.

Разработка наночастиц (окси)гидроксидов металлов, выступающих в качестве агрегатора коагуляционных белков и способных изменять ионный баланс биологической среды, является перспективным направлением для создания материалов с гемостатическим действием. В частности, (окси)гидроксиды Al и Fe со слоистой структурой являются хорошими кандидатами в качестве агентов для модуляции параметров биологических жидкостей [1], благодаря большой удельной поверхности [2, 3], высокой плотности поверхностного заряда [4] уникальным кислотно-щелочным или амфотерным свойствам [5], а также селективности в адсорбции биомолекул и ионов биосреды [6, 7]. Более того, недавно было показано, что такие наноматериалы могут проявлять гемостатическое действие, в частности, волокнистый материал, содержащий низкоразмерные электроположительные наноструктуры оксигидроксида алюминия ($\gamma\text{-AlOOH}$), сокращает время паренхиматозного кровотечения [8]. Кроме того, согласно результатам [9], наноструктуры бемита AlOOH , гематита Fe_2O_3 и гетита FeOOH избирательно адсорбируют и агрегируют компоненты крови, что может быть фактором, влияющим на гемостаз.

В настоящем исследовании с целью получения численных оценок, характеризующих способность наноллистов AlOOH и $\text{Fe}(\text{OH})_2$ накапливать биоактивное соединение, образуя иерархический наноагент, проведено молекулярно-динамическое моделирование с анализом изменения свободной энергии Гиббса при адсорбции-десорбции молекулы серотонина (в катионном и цвиттер-ионном состоянии) на регулярной поверхности этих наноматериалов. Используя управляемую молекулярную динамику и анализ потенциала средней силы, показано, что адсорбция серотонина AlOOH может происходить с образованием водородных связей как аминогруппой с атомами кислорода поверхностных гидроксидных групп, так и кислородом фенольного кольца с водородом OH-групп наноллиста в зависимости от pH (Рис. 1). При этом взаимодействие как цвиттер-ионного, так и катионного серотонина с наноллистом гидроксида двухвалентного железа $\text{Fe}(\text{OH})_2$ характеризуется слабой адсорбцией.

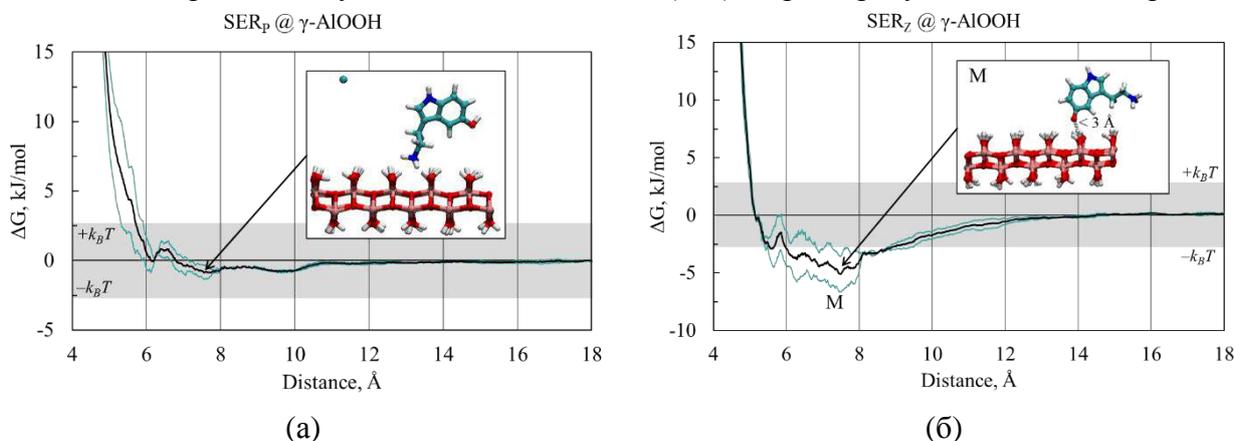


Рис. 1. Оценка профилей изменения свободной энергии серотонина в катионном (а) и цвиттер-ионном (б) состояниях при адсорбции-десорбции наноллистом AlOOH .

Одним из возможных механизмов воздействия низкоразмерных гидроксидов Al и Fe на биологическую среду является адсорбция различных ее компонентов, что приводит к очистке среды и облегчению действия лекарств или биологически активных соединений, что особенно важно для гемостатических агентов. Точный механизм потенцирования действия гемостатических агентов низкоразмерными гидроксидами металлов в настоящее время не полностью ясен, поэтому представляется важным исследовать взаимодействие этих наноматериалов с биомолекулами и лекарственными средствами, в частности, с точки зрения их конкурентной адсорбции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Соглашение № 14.604.21.0156, Идентификатор проекта RFMEFI60417X0156). Исследование проводится с использованием оборудования общих исследовательских мощностей вычислительных ресурсов высокопроизводительных вычислений МГУ им. М.В. Ломоносова [10, 11].

1. M. I. Lerner et al., *Nano Letters* 18(9), 5401–5410 (2018).
2. O. V. Bakina et al., *Advanced Powder Technology*. 26(6), 1512-1519 (2015).
3. M. Krizek et al., *AIP Conf. Proc.* 1489(1), 88-94 (2012).
4. S. Lozhkomoev et al., *Nanotechnology* 27(20), 205603 (2016).
5. S. Lozhkomoev et al., *Nanotechnologies in Russia* 11(7-8), 506–511 (2016).
6. S. Lozhkomoev et al., *Physical Mesomechanics* 20(2), 134–141 (2017).
7. R. Chitrakar et al., *J. of Colloid and Interface Science* 298(2), 602-608 (2006).
8. M. I. Lerner et al., *AIP Conf. Proc.* 1623(1), 339-342 (2014).
9. S. Lozhkomoev and S. O. Kazantsev, *IOP Conf. Series: Mater. Sci. and Engineer.* 447(1), 012072 (2018).
10. V.I. Voevodin, et al. *Supercomputing Frontiers and Innovations* 6(2), 4–11 (2019).
11. V. Adinets et al., *Numerical methods and programming: Advanced Computing* 13(4), 160–166 (2012).

DOI: 10.17223/9785946218412/437

**ЭВОЛЮЦИЯ ВЗГЛЯДОВ НА ФИЗИЧЕСКУЮ ПРИРОДУ МЕДЛЕННЫХ
ДЕФОРМАЦИОННЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ В ГЕОСРЕДАХ**

^{1,2}Макаров П.В., ^{1,2}Перышкин А.Ю.

¹*Институт физики прочности и материаловедения, Томск*

²*Томский государственный университет, Томск*

В работе рассмотрена эволюция взглядов на физическую природу медленных деформационных возмущений в геосредах. Отмечены накопившиеся противоречия и явные заблуждения, изложена автосолитонная концепция медленной деформационной динамики в активной (нагруженной) нелинейной геосреде.

К настоящему времени в науках о Земле прочно утвердилась парадигма неомобилизма. Эта парадигма включает обширную совокупность современных идей, гипотез и теорий, предполагающих ведущую роль горизонтальных движений земной коры и значительные горизонтальные перемещения континентальных масс. Однако, в рамках этой глобальной парадигмы сосуществует множество идей и представлений, в том числе остродискуссионных и противоречивых, относительно физических причин и конкретных механизмов её реализации.

К таким остродискуссионным проблемам можно отнести и концепцию медленных деформационных «волн» Земли [1-7].

Как проявление медленной динамики, медленные деформационные возмущения вносят существенный вклад как в процессы перераспределения деформаций и напряжений в нагруженной, т.е. активной геосреде, так и в перераспределении в ней энергии и в формирование очагов разрушения [6,7].

Одним их первых обзоров по этой тематике, выполненный С.В. Гольдиным с соавторами в 2002 г., называется «Медленные движения: миф или реальность?» [1]. Из названия видно, что изучаемые деформационные возмущения не рассматриваются как волновые, однако в последующих работах, различные авторы стали использовать термин «волна». Скорости таких деформационных возмущений оценивались в 1-100 км/год [1,2,5]. Были также выявлены более быстрые деформационные миграции со скоростями 1-10 км/сутки. По этой тематике написаны подробные обзоры [1-5], к которым и отсылаем читателей.

История вопроса связана с попытками объяснить явление направленной миграции сейсмических активизаций вдоль разломов. Это открытие было сделано Е.Ф. Рихтером (E.F. Richter) в 1958 году [8]. Было выдвинуто предположение, что миграции сейсмических активизаций вдоль разломов обусловлены распространением по разлому медленных деформационных волн. В дальнейшем и сам процесс сейсмических активизаций стал рассматриваться как волновой.

Следующий этап эволюции концепции медленных движений связан с пониманием их автоволновой природы [5-7,9]. Геосреда находится в поле сил тяжести и тектонических напряжений. По этой причине является активной средой, в которой возможны деформационные возмущения в виде автоволн, как бегущих, так и статических [Мы, Зуев]. Известно, что при встрече двух автоволн они аннигилируют. Рассчёты медленных деформационных возмущений, выполненные нами по модели, изложенной в работах [6,7], выявили их автосолитонную природу [7]. При встрече таких двух бегущих деформационных возмущений они взаимодействуют как не вполне упругие частицы. После взаимодействия они расходятся с изменениями амплитуд и формы возмущений [7]. Наблюдаются также статические и пульсирующие деформационные автосолитонные возмущения. Области локализации деформационных процессов, т.е. области формирующихся разломов в этой модели есть статические автосолитоны. Эти представления являются более общими и расширяют понятие медленных деформационных возмущений, как автоволнового процесса.

1. Гольдин С.В., Юшин В.И., Ружич В.В., Смекалкин О.П. Медленные движения миф или реальность?//Физические основы прогнозирования разрушения горных пород: Матер. IX Межд. школы-семинара, Красноярск, 2002. -Новосибирск: Акад. изд-во «Гео», 2002. - С. 213-220.
2. Быков В.Г. Деформационные волны Земли: концепция, наблюдения и модели// Геология и геофизика. -2005. - Т. 46. -№ 11. -С. 1176-1190.
3. Быков В.Г. Нелинейные волны и солитоны в моделях разломно-блоковых геологических сред // Геология и Геофизика. 2015. Т.56. - №.5. – с. 1008-1024.
4. V.G. Bykov, S.V. Trofimenko Slow strain waves in blocky geological media from gps and seismological observations on the amurian plate // Nonlinear processes in geophysics. 2016. 23(6). P. 467–475.
5. Кузьмин Ю.О. Деформационные автоволны в разломных зонах//Физика Земли. -2012. -№ 1. -С. 3-19.
6. P.V. Makarov and A.Yu. Peryshkin Slow motions as inelastic strain autowaves in ductile and brittle media // Physical Mesomechanics. 2017. 20(2), p. 209-221.
7. P.V. Makarov Yu.A. Khon and A.Yu. Peryshkin Slow deformation fronts: model and features of distribution // Geodynamics and Tectonophysics. 2018. - 9(3), p. 755–769.
8. Richter C.F., 1958. New dimensions in seismology: earthquakes are characterized by geographical position, instant of occurrence, depth, and magnitude. Science 128 (3317), 175–182.
9. Зуев Л.Б., Данилов В.И., Баранникова С.А. Физика макролокализации пластического течения. -Новосибирск: Наука, 2008. -328 с.

Секция 10. Иерархически организованные
структуры в молекулярной биологии

DOI: 10.17223/9785946218412/438

ИЗМЕНЕНИЯ ИЕРАРХИЧЕСКИ ОРГАНИЗОВАННЫХ СТРУКТУР НЕФТИ В ПРОЦЕССЕ ФЕРМЕНТАТИВНОЙ БИОДЕСТРУКЦИИ

Сваровская Л.И., Алтунина Л.К.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск

Биодеструкция углеводородов нефти лежит в основе многих биотехнологий, в том числе биотехнологии увеличения нефтеотдачи и рекультивации нефтезагрязненных почв. В модельном эксперименте, приближенном к условиям залежи, биодеструкцию нефтей Западной Сибири проводили в жидкой среде при постоянном перемешивании в течение 60 суток. Процесс перемешивания улучшает водо-воздушный режим и повышает ферментативную окислительную активность микроорганизмов. Для эксперимента отобраны нефти Северо-Комсомольского (С-К), Ханты-Мансийского (Х-М) и Казанского (КАЗ) месторождений. Отмечено, что в процессе биодеструкции происходит одновременное изменение иерархически организованных структур: ароматических углеводородов и высокомолекулярных фрагментов нефти - смол и асфальтенов, играющих значительную роль в изменении физико-химических свойств нефтей [1]. Сравнительный анализ физико-химических свойств сырых и биодеструктивных нефтей показал значительные изменения вязкости и плотности (рис. 1). Причиной может служить образование эмульсии «вода в нефти» с увеличением содержания смол и асфальтенов.

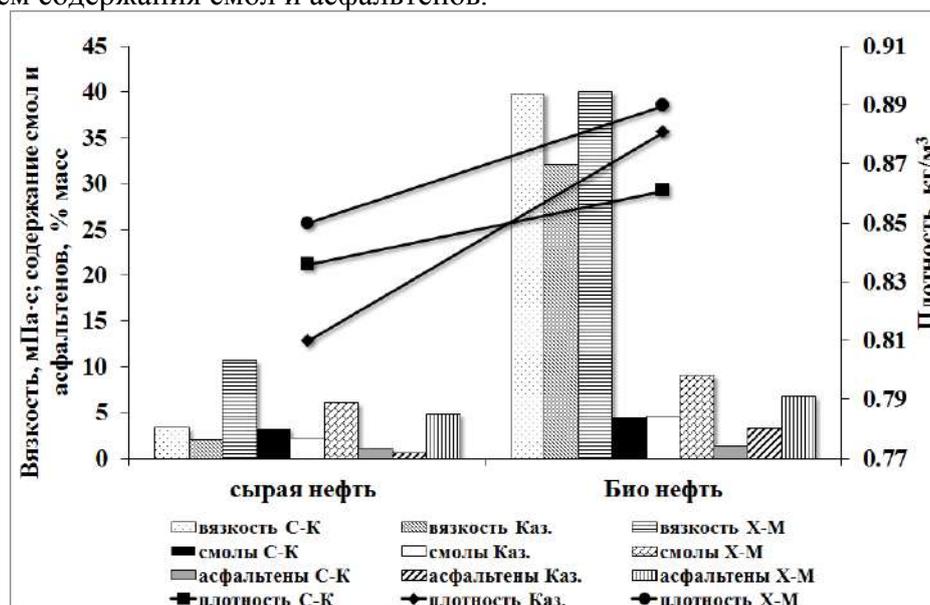


Рис. 1. Биодеструктивные изменения физико-химических свойств и гетероатомных соединений в составе нефтей.

Смолисто-асфальтеновые вещества (САВ) не относятся к отдельному классу органических веществ, они представляют собой смесь высокомолекулярных полициклических ароматических структур, соединенных между собой гетероатомными соединениями, содержащими серу, кислород и азот. Смолы и асфальтены генетически зависят друг от друга и влияют на изменение плотности и вязкости нефтей. Наиболее разнообразными по химическому составу и строению являются нефтяные смолы, которые представляют собой малоподвижные вязкие жидкости или аморфные твердые тела от темно-коричневого до темно-бурого цвета, плотностью несколько выше единицы и молекулярной массой 600-1200 а.е. Асфальтены – это продукты конденсации нескольких молекул смол, являются твердыми веществами с кристаллоподобной структурой, химически активны и легко окисляются [2]. Для асфальтенов характерна высокая ароматичность и полидисперсность.

В процессе биодеструкции при контакте микроорганизмов с нефтью образуются кислородсодержащие соединения, подтверждающие наличие процессов биодеструкции.

Секция 10. Иерархически организованные структуры в молекулярной биологии

Исследование структурно-химических характеристик сырых и биодegradированных нефтей проводили методом ИК-спектрометрического анализа. Так кислородсодержащие соединения, как продукты метаболизма (спирты, кислоты, альдегиды), при окислении насыщенных ациклических углеводородов формируют полосу поглощения (п.п.) в области спектра 1700-1710 см⁻¹. Окисление ароматических углеводородов протекает с накоплением кетонов и сложных эфиров, которые формируют п.п. в области 1735 см⁻¹. Данные ИК – спектрометрии позволили рассчитать величину спектральных коэффициентов, характеризующих более точные изменения в процессе биодеструкции углеводородов нефти (табл.).

Таблица 1. Спектральные коэффициенты нефтей.

Спектральные коэффициенты	Месторождение нефти								
	Казанское			Северо - Комсомольское			Ханты - Мансийское		
	исх.	био30	био60	исх.	био30	био60	исх.	био30	био 60
С ароматичности	0.56	0.60	0.67	0.51	0.55	0.59	0.46	0.54	0.71
С алифатичности	7.17	6.9	6.24	6.73	6.67	6.52	9.55	6.21	5.89
С разветвленности	0.56	0.53	0.52	0.53	0.48	0.46	0.56	0.52	0.51
С окисленности	0.02	0.04	0.06	0.021	0.027	0.05	0.02	0.03	0.06

Коэффициенты алифатичности и разветвленности, характеризующие изменения в содержании парафинов, во всех вариантах опыта уменьшаются. Разрушение одновалентных связей в структуре парафинов не требуют значительной затраты энергии. Их окисление проходит в первую очередь. Величина остальных коэффициентов, отражающих отношение оптических плотностей ароматических структур и активность окислительных процессов, увеличивается.

В процессе биодеструкции нефтей при образовании эмульсий, доля смол и асфальтенов, содержащих основную часть микроэлементов нефти, обычно увеличивается. Между содержанием ароматических углеводородов, смол и асфальтенов, плотностью и вязкостью нефтей существует четкая положительная корреляция (среднее $\rho = 0.8$), которая определяет иерархическую зависимость физико-химических свойств нефтей [3].

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХН СО РАН (Проект V. 46.1.2), финансируемого Министерством науки и высшего образования Российской Федерации.

1. Обороин А.А. Нефтезагрязненные биоценозы. Изд-во УрО РАН. Пермь. 2008. 511 с.
2. Ollivier B., Cayol J.L., Fauque G. Sulphate-reducing bacteria from oil field environments and deepsea hydrothermal vents //Sulphatereducing bacteria. Environmental and engineered systems, L.L. Barton and W.A. Hamilton (Eds.). Cambridge University Press. 2007. P. 305–328.
3. Tissot B.P., Welte D.H. Petroleum formation and occurrence //Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York. 1978. P. 501.

DOI: 10.17223/9785946218412/439

**РАЗРАБОТКА ПОЛИМЕРНОГО КАРКАСА КАК ОСНОВЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ
ТКАНЕИНЖЕНЕРНОГО СОСУДИСТОГО ПРОТЕЗА**

Великанова Е.А., Матвеева В.Г., Кривкина Е.О., Севостьянова В.В., Ханова М.Ю.,
Кудрявцева Ю.А., Антонова Л.В.

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-исследовательский институт комплексных проблем сердечно-сосудистых заболеваний», Кемерово

Важным направлением тканевой инженерии является разработка протезов сосудов малого диаметра. [1] Для успешного решения этой задачи в условиях *in vitro* необходимо сочетание трех основных условий: формирование каркаса из биосовместимого материала, использование оптимальной культуры клеток, обеспечение, по возможности, максимально физиологических условий формирования эндотелиального монослоя.

Активные исследования ведутся в области разработки скаффолда – подбор материалов, способных формировать поверхность, пригодную для роста клеток и при этом выдерживать биомеханическую нагрузку, сопровождающую функционирование кровеносного сосуда. В настоящее время популярны различные синтетические полимеры, обладающие оптимальными механическими и физико-химическими характеристиками; однако в большинстве случаев они требуют дополнительной модификации поверхности для увеличения биосовместимости и стимуляции адгезии и роста клеток. В частности, в различных исследованиях было показано успешное использование с этой целью коллагена [2].

Цель исследования: создание биосовместимого полимерного трубчатого каркаса методом электроспиннинга и формирование на его основе эндотелиального слоя в условиях пульсирующего потока.

Материалы и методы

Графты изготавливали методом электроспиннинга из поли(3-гидроксипропирата-ко-3-гидроксивалерата) и поли(ϵ -капролактона) в соотношении 1:2, растворенных в 1,1,1,3,3,3-гексафлуоро-2-пропанол. Для улучшения биосовместимости в состав внутренней трети стенки графтов вводился коллаген I типа. Для проведения экспериментов были использованы полученные из периферической крови пациентов с ИБС колониеформирующие эндотелиальные клетки (ECFCs). Клетки получали по протоколу Koble [4]. Эксперименты проводили в стерильных условиях, культивировали в условиях CO₂-инкубатора при 37°C, 5% CO₂. Внутреннюю поверхность графтов покрывали раствором фибронектина человека в концентрации 10 мкг/мл. В графты вводили суспензию клеток в концентрации 700 тыс./мл. Для предварительного заселения поверхности клетками графты культивировали в статических условиях. Затем графты подключали в систему пульсирующего биореактора и культивировали с постепенным увеличением значения напряжения сдвига до 2,85 дин/см². Общее время культивирования составило 7 суток. В качестве контроля использовали графты, культивированные в статических условиях. Структуру поверхности графтов изучали методом сканирующей электронной микроскопии. Проводили иммунофлуоресцентное окрашивание внутренней поверхности графта на маркеры эндотелиальных клеток: CD31, VEGFR2, CD144, vWF, маркер адгезии F-actin, ламинин, талин и на коллаген IV типа.

Результаты и обсуждение.

Сканирующая электронная микроскопия показала, что сосудистые графты обладали высокопористой структурой и гомогенными хаотично переплетенными волокнами диаметром от 0,7 до 3,0 мкм, при этом волокна покрыты коллагеном. Таким образом, архитектура поверхности соответствует ожидаемой для использования в качестве клеточного носителя.

Оценка количества клеток на поверхности графта показала, что покрытие фибронектином значительно увеличивало адгезию клеток, а также равномерность их

распределения по поверхности. Поэтому для дальнейших исследований использовали графты, покрытые фибронектином.

Культура ECFCs при культивировании в статике и в условиях потока сохраняла фенотип, интенсивно экспрессируя маркеры эндотелиальных клеток CD31, CD144. Под действием напряжения сдвига значительно усиливалась экспрессия VEGFR2. Был отмечен выраженный синтез vWF, коллагена IV типа, а также ламинина., что свидетельствует о функциональной активности клеток. Как в статике, так в динамике в клетках обнаруживали выраженные филаменты F-актина, при этом при культивировании в динамических условиях отмечали их большую упорядоченность и тенденцию к ориентированию по направлению потока (Рис.1).

Таким образом, ECFCs демонстрировали адаптацию к действию напряжению сдвига, выражавшуюся в увеличении синтетической активности, усилении экспрессии VEGFR2, механотрансдукции, ориентации клеток по направлению потока.

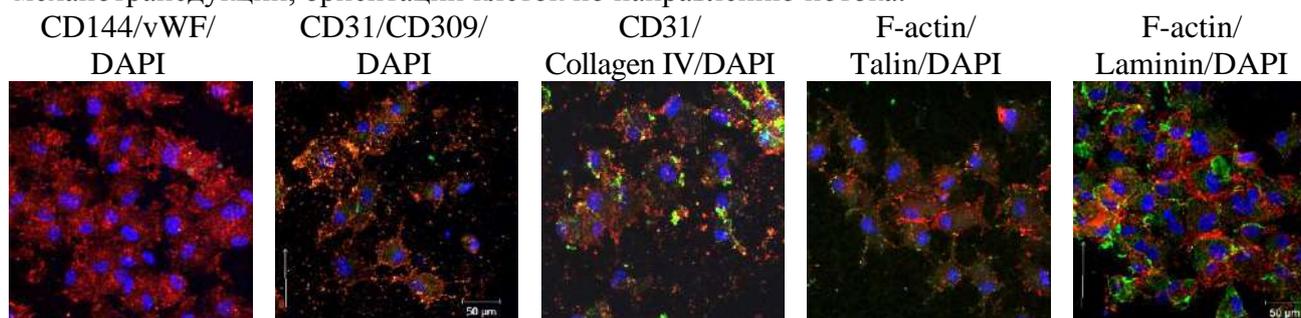


Рис. 1. Результаты культивирования ECFCs в пульсирующем потоке. Иммунофлуоресцентное окрашивание. Лазерная сканирующая микроскопия, ув. х63.

Заключение. С помощью отдельной подачи растворов ПГБВ/ПКЛ и коллагена I методом электроспиннинга есть возможность формировать каркас сосудистого графта, пригодного для поддержания клеточной жизнеспособности. Дополнительная обработка поверхности раствором фибронектина улучшает адгезию клеток. Хорошая биосовместимость графта подтверждается успешным культивированием колониеформирующих эндотелиальных клеток на поверхности в условиях пульсирующего потока.

Данное исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №17-75-20004 «Разработка физиологически обоснованной технологии изготовления персонализированного тканеинженерного сосудистого импланта малого диаметра in vitro в условиях имитации естественного кровотока с использованием клеточных технологий»).

1. Benrashid E, McCoy CC, Youngwirth LM, Kim J, Manson RJ, Otto JC, Lawson JH. Tissue engineered vascular grafts: Origins, development, and current strategies for clinical application. *Methods* 2016; 99:13-9.
2. Dippold, D.; Cai, A.; Hardt, M.; Boccaccini, A.R.; Horch, R.; Beier, J.P.; Schubert, D.W. Novel approach towards aligned PCL-collagen nanofibrous constructs from a benign solvent system. *Mater. Sci. Eng. C* 2017, 72, 278–283.
3. Kolbe M, Dohle E, Katerla D, Kirkpatrick CJ, Fuchs S. 2010. Enrichment of outgrowth endothelial cells in high and low colony-forming cultures from peripheral blood progenitors. *Tissue Eng Part C Methods*. 16(5): 877-886

DOI: 10.17223/9785946218412/440

**VIBRON DRESSING IN THE THREE PARALLEL MACROMOLECULAR CHAIN
STRUCTURE**

¹Cevizovic D., ¹Ivic Z., ¹Galovic S., ²Chizhov A., ³Reshetnyak A.

¹¹*University of Belgrade, "Vinca" Institute of Nuclear sciences, Laboratory for Theoretical and Condensed Matter Physics, Belgrade, Serbia*

²*Joint Institute for Nuclear Research, Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Dubna, Russia*

³*Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia*

The macromolecules like DNA as well as other biological structures that consist of several parallel macromolecular chains play important role in the process of bioinformation transmission in living cells [1]. On the other hand, due to its good features in the field of miniaturization of microelectronic and optoelectronic devices, there appears a renewed interest for application of such structures in construction of nanocrystals, nanowires, and molecular circuits.

Earlier, the properties of both the intramolecular vibrational excitation (vibron) in a quasi 1D macro-molecular structure, and the case of two macromolecular chains. were studied in our papers [9-11], in part, within improved Holstein molecular crystal model [2,3,4]. There it was supposed that due to the vibron interaction with optical phonon modes, vibron form partially dressed small polaron states. The properties of these states were investigated, in dependence on basic system parameters and temperature of a thermal bath

In this work, we studied the properties of the single intramolecular vibration excitation in the structure consisted of three parallel macromolecular chains. We again assumed that the vibration dressing occurs due to the vibrational excitation with optical phonon modes. The influence of the thermal bath temperature and the dipole-dipole interaction between nearest neighbouring structure elements on the quasiparticle properties was considered. In order to examine the influence of the strength of interaction coupling on the vibration dressing, we employed partial dressing method. We found that the vibration dressing continuously exchanges, from slightly dressed, practically free excitation, to heavy dressed small polaron excitation. Obtained results are compared to one predicted to standard small polaron theory [2-7].

1. Davydov A.S., The Theory of Contraction of Proteins under their Excitation // J. Theor. Biol. 1973. V.38 p.559-569.
2. Holstein T., Studies of polaron motion: Part I. The Molecular-Crystal Model; Part II. The "small" polaron// Ann. of Phys., 1959 V.8, P.325-342;343-389.
3. Čevizović D., Galović S., Ivić Z., Nature of the vibron self-trapped states in hydrogen-bonded macromolecular chains // Phys. Rev. E, 2011. V.84. P.011920.
4. Lang I.G., Firsov Yu.A., Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1962 V.43. P.1843.
5. Yarkony D., Silbey R., Comments on exciton phonon coupling: Temperature dependence. // J. Chem. Phys. 1976. V.65. p.1042-1052.
6. Emin D., Phys. Rev. Lett. 1972. V.28. p.604.
7. Toyozawa Y., Self-trapping of an electron by the acoustic mode of the lattice vibration// Prog. Theor. Phys. 1961. V.26. p.29.
8. Čevizović D., Galović S., Reshetnyak A., Ivić Z., The vibron dressing in α -helical macromolecular chains // Chin. Phys. B, 2013, V.22. P.060501.
9. Čevizović D., Galović S., Petković S., Chizhov A., and Reshetnyak A., Vibron properties in quasi 1D molecular structures: the case of two parallel unshifted macromolecular chains // IOP Conf. Series: J. of Physics Conf. Ser. 2016, V. 670. P.012018.
10. Čevizović D., Ivić Z., Galović S., Chizhov A., Reshetnyak A., On the vibron nature in the system of two parallel macromolecular chains: the influence of interchain coupling // Physica B, 2016 V.490 P. 9-15.
11. Cevizovic D., Chizhov A., Reshetnyak A., Ivic Z., Galovic S., On the vibron-polaron damping in quasi 1D macromolecular chains // Journal of Physics: Conf. Series 2018. V,965. P. 012011.

Секция 11. Разработка оборудования
для формирования материалов с иерархически
организованной структурой и приборов
для исследования их структуры, свойств
и деформационного поведения

DOI: 10.17223/9785946218412/441

ВЛИЯНИЕ ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ АУСТЕНИТНОГО СПЛАВА

¹Попова Н.А., ^{1,2}Никоненко Е.Л., ³Ерболатова Г.У., ⁴Калашников М.П., ⁵Никоненко А.В.

¹Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск

²Национальный исследовательский Томский государственный политехнический университет, Томск

³Восточно-Казахстанский государственный технический университет им. Д. Серикбаева, Усть-Каменогорск

⁴Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

⁵Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск

Методом просвечивающей дифракционной электронной микроскопии проведено исследование изменения фазового состава и тонкой структуры сплава аустенитного класса 40ХНЮ под действием химико-термической обработки – электролитно-плазменной нитроцементации. Электролитно-плазменная нитроцементация проводилась путем поверхностного насыщения азотом и углеродом в водном растворе (20% карбамид $\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$ + 15% кальцинированная сода Na_2CO_3 + 10% глицерин + 55% дистиллированная вода H_2O) в течение 5 минут при температуре 700 С. Изучение образцов проводилось в двух состояниях: 1) до модификации (исходное состояние) и 2) после модификации (нитроцементации) в приповерхностной зоне образца.

Установлено, что в исходном состоянии сплав 40ХНЮ является многофазным. Матрицей сплава (основной фазовой составляющей) является фаза $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$, **объемная** доля которой – 70%. Фаза $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$ – это твердый раствор атомов Al, Cr и Ni (основа – атомы Ni) с ГЦК кристаллической решеткой и ближним атомным порядком в расположении атомов (неупорядоченная фаза). Присутствует эта фаза в виде зерен, резко различных по размеру: вдоль границ крупных зерен (4-12 мкм), составляющих основу материала, располагаются мелкие зерна (1-4 мкм), объемная доля которых – не более 5% от общей доли зерен в сплаве. Мелкие зерна, как правило – однофазные, крупные – двух и трехфазные. Двухфазные зерна – это зерна $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$, внутри которых присутствуют либо пластинчатые выделения ОЦК фазы NiAl, либо в виде мелких зерен ГЦК фаза AlCrNi_2 . Трехфазные зерна – это зерна $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$, внутри которых присутствуют одновременно фазы и NiAl, и AlCrNi_2 .

Дислокационная субструктура в двухфазных зернах с пластинчатыми выделениями фазы NiAl – хаотическая и сетчатая; в однофазных и двухфазных с зернами фазы AlCrNi_2 – ячеисто-сетчатая; в трехфазных зернах – фрагментированная. В зернах фазы AlCrNi_2 дислокации образуют сетчатую субструктуру.

Нитроцементация привела к созданию на поверхности образца модифицированного слоя. В приповерхностной зоне, как и в исходном состоянии, матрицей является фаза $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$. Тем не менее, произошло изменение фазового состава на поверхности образца и, соответственно, вида зеренной структуры. А именно, в трехфазных зернах $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$, NiAl и AlCrNi_2 , которые присутствовали в исходном состоянии сплава, нитроцементация привела к образованию в матрице $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$ наночастиц Cr_2N округлой формы и Al_2Ni_3 игольчатой формы. В двухфазных зернах $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$ и AlCrNi_2 – в зернах AlCrNi_2 образовались наночастицы Cr_2N округлой формы.

Кроме того, установлено, что нитроцементация привела к неоднородности по концентрации твердых растворов $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$ и AlCrNi_2 . Об этом свидетельствуют нарушения дифракционных картин, полученных с соответствующих участков структуры (появление вблизи основных рефлексов сателлитов, тяжей, контраст на изображении в электронном микроскопе типа «соль-перец», хорошо заметный на темнопольных изображениях).

Тип дислокационной структуры в зернах фазы AlCrNi_2 не изменился, в зернах $\text{Al}_{0.7}\text{Cr}_{0.3}\text{Ni}_3$ – присутствуют только хаотически распределенные дислокации.

Секция 11. Разработка оборудования для формирования материалов с иерархически организованной структурой и приборов для исследования их структуры, свойств и деформационного поведения

DOI: 10.17223/9785946218412/442

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ РЕГИСТРАЦИИ ДИНАМИЧЕСКИХ НАГРУЗОК С ПОМОЩЬЮ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИХ ДАТЧИКОВ

¹Аношкин А.Н., ¹Шипунов Г.С., ¹Воронков А.А. ¹Никифоров А.С.

¹Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

В настоящее время использование композиционных материалов (КМ) в авиационной технике и конструкциях авиационных двигателей увеличивается с каждым годом. Замена металлических сплавов вызвана тем, что композиционные материалы более легкие, по сравнению с металлами, а, следовательно, использование таких материалов приводит к снижению веса самих авиационных конструкций и к повышению энергоэффективности. К сожалению, в настоящее время еще не снят вопрос о безопасности и надежности таких конструкций, изготовленных из полимерных композиционных материалов (ПКМ), испытывающих, как правило, динамические нагрузки во время эксплуатации. Таким образом становятся актуальными проблемы мониторинга таких конструкций, изготовленных из ПКМ, в режиме реального времени [1-3]. В связи с этим, актуальным является разработка системы мониторинга, которая необходима для регистрации полей деформаций конструкций при динамических нагрузках при помощи волоконно-оптических датчиков (ВОД) на основе решеток Брэгга.

Система мониторинга включает в себя: объект мониторинга, оснащенный волоконно-оптическими датчиками, интеррогатор, необходимый для регистрации данных с ВОД, и программное обеспечение, позволяющее обработать информацию, полученную с ВОД. Такая система мониторинга позволит в режиме реального времени располагать данными о состоянии конструкции, а именно работоспособна ли она или имеются повреждения, которые могут привести к разрушению.

Основным элементом системы мониторинга являются волоконно-оптические датчики. ВОД на основе решеток Брэгга представляют собой участок оптического волокна с наведенным периодическим изменением показателя преломления. На этом участке часть спектра отражается с определенной длиной волны [4-5]. Сдвиг спектрального положения резонансной длины волны волоконной брэгговской решетки напрямую зависит от деформаций, таким образом может быть получено поле деформаций в любой момент времени. При эксплуатации такой системы мониторинга интеррогатор излучает широкополосный спектр оптического излучения в диапазоне 1500-1600 нм на ВОД на основе решеток Брэгга, которыми оснащен объект мониторинга.

В качестве объекта исследования в данной работе рассматривается прямоугольный образец, изготовленный из полимерного композиционного материала с переплетенными углеродными нитями и внедренными в структуру ВОД. Для получения более полной информации при динамическом нагружении на поверхности образца были размещены три дополнительные решетки Брэгга. (Рисунок 1)

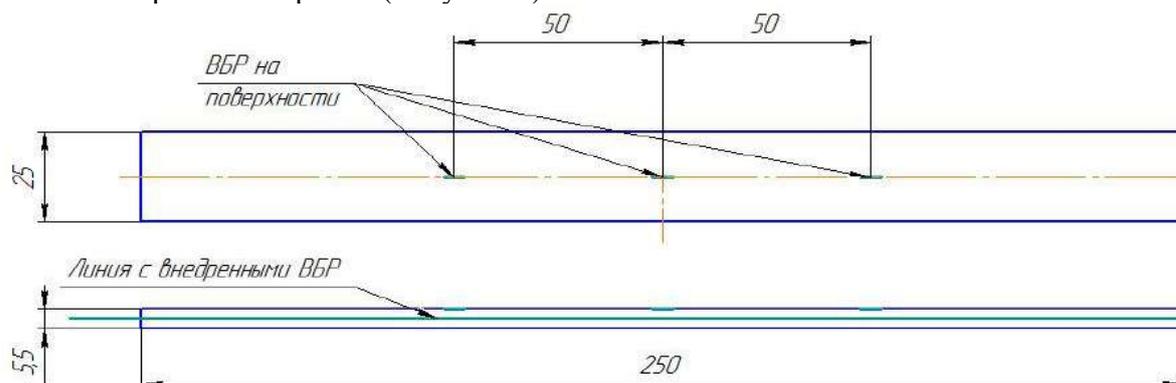


Рисунок 1. Схема образца

Секция 11. Разработка оборудования для формирования материалов с иерархически организованной структурой и приборов для исследования их структуры, свойств и деформационного поведения

Изготовленный образец консольно закреплялся на вибростенде для приложения к нему динамической нагрузки и получения необходимой информации об изменении полей деформаций. С целью увеличения амплитуды колебаний на конце образца был закреплен дополнительный груз. (Рисунок 2)

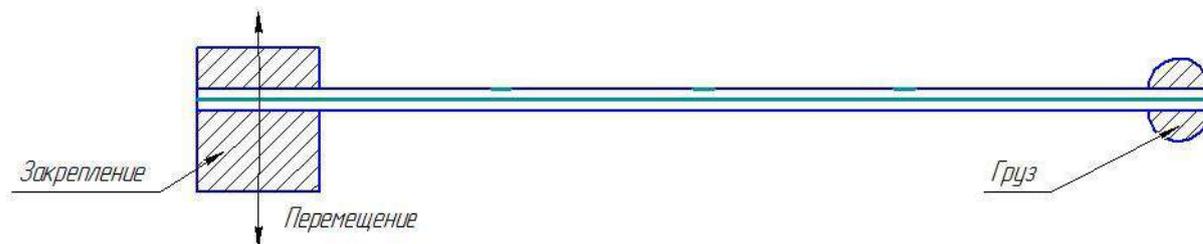


Рисунок 2. Схема испытаний

В ходе проведения эксперимента снимались показания с волоконно-оптических датчиков, которые были переданы в математическую модель для исследования повреждаемости исследуемого образца. В дальнейшем такой подход будет использоваться для оценки повреждаемости полноразмерных композитных конструкций работающих в условиях сложного динамического нагружения в процессе стендовых и летных испытаний.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 11.2391.2017/4.6

1. К вопросу об интеграции оптоволокна в ПКМ и измерении деформации материала с помощью волоконных Брэгговских решеток / М.А. Зуев, В.В. Махсидов, М.Ю. Федотов, А.М. Шиенок // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2014. – Т. 20, № 4. – С. 568–574.
2. Fracture mechanism characterization of cross-ply carbon–fiber composites using acoustic emission analysis / Y. Mizutani, K. Nagashima, M. Takemoto, K. Ono // NDT&E Int. – 2000. – Vol. 33(2). – P. 101–110.
3. Варжель С.В. Волоконные брэгговские решетки / Ун-т ИТМО. – СПб., 2015. – 65 с.
4. Zhou G., Sim L. Evaluating damage in smart composite laminates using embedded EFPI strain sensors. Opt. Lasers Eng., 2009, vol. 47, pp. 1063-1068.
5. Yashiro S., Takeda N., Okabe T., Sekine H. A new approach to predicting multiple damage states in composite laminates with embedded FBG sensors. Composites Science and Technology, 2005, vol. 65, pp. 659-667.

Секция 11. Разработка оборудования для формирования материалов с иерархически организованной структурой и приборов для исследования их структуры, свойств и деформационного поведения

DOI: 10.17223/9785946218412/443

РАЗРАБОТКА ТРИБОМЕТРА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТРИБОЛОГИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ В ВАКУУМЕ

Жуков Л.Л., Соколов П.С., Белобородов В.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Проведение современных исследований невозможно без нового высокотехнологичного оборудования. Однако, коммерческие образцы испытательного оборудования для трибологических испытаний не всегда соответствуют возможностям исследовательских лабораторий. Также стандартное серийно выпускаемое оборудование не всегда соответствует требованиям к проводимым новым экспериментальным исследованиям. Особенно при испытании новых перспективных материалов. В связи с этим возникает необходимость модернизации существующего испытательного оборудования или создания нового.

Целью данной работы являлась разработка современного трибометра для исследования процесса сухого трения скольжения в вакууме и экспериментальная проверка его работоспособности.

Для разработки трибометра привлекался метод компьютерного твердотельного моделирования. С помощью которого была разработана общая компоновка оборудования. По завершению этапа разработки был изготовлен опытный образец трибометра. Трибологические испытания выполнены в условиях воздушной атмосферы и вакуума при сухом трении скольжения по схеме палец диск. Для трения в вакууме трибометр помещался в вакуумную камеру, где создавалось давление 9×10^{-3} Па. В качестве образцов использовались шарики из стали ШХ15, в качестве контртел использовались алюминиевые диски. Трение скольжения осуществлялось при скорости 0,3 м/с при комнатной температуре. В процессе трения регистрировалось значение силы трения, которое с учетом нормальной нагрузки пересчитывалось в коэффициент трения. После проведения испытаний с помощью лазерного сканирующего микроскопа Olympus проводилась оценка состояния поверхностей стальных шариков и алюминиевых дисков.

Проверка работоспособности трибометра в вакууме осуществлялась с применением вакуумной камеры электронно лучевой установки, ранее разработанной в ИФПМ СО РАН. В результате проведения проверочных испытаний получены графики изменения силы трения во времени в различных условиях. При трении в вакууме происходит повышение коэффициента трения скольжения, по сравнению с трением в воздушной атмосфере. После трения в воздушной среде поверхность дорожек трения на алюминиевых дисках темная, что свидетельствует о её интенсивном окислении с образованием оксидов алюминия. Следов обратного адгезионного переноса не наблюдается. После трения в вакууме на поверхности дорожки трения следов окисления значительно меньше, а также наблюдается множество «вырывов» и фрагментов слоя обратного адгезионного переноса. Результаты анализа поверхности стальных шариков коррелируют с состоянием дорожек трения на алюминиевых образцах. Так на шарике после трения в воздушной атмосфере наблюдается темное пятно оксидов и совсем небольшое количество налипшего алюминия. В свою очередь на шарике после трения в вакууме мы наблюдаем толстый слой налипшего алюминия. Интенсивное налипание алюминия на поверхность стального шарика и обратный адгезионный перенос провоцирует повышение силы трения.

Дальнейшее направление работ предполагает разработку оснастки для расширения функциональных возможностей трибометра. В частности планируется: во-первых, оснастить трибометр тепловизором для осуществления мониторинга тепловых полей в зоне трибосопряжения. Во-вторых, оснастить трибометр блоком внешнего нагрева зоны трибосопряжения для исследования влияния температуры на фрикционные процессы в вакууме.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.2.

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Институт химии нефти СО РАН, Томск

Министерство науки и высшего образования РФ, Москва

Сибирское отделение РАН, Новосибирск

Объединенный Научный совет РАН по химии нефти, газа, угля и биомассы,
Москва

Администрация Томской области, Томск

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Институт химии и химической технологии Монгольской академии наук, Улан-
Батор (Монголия)

Кафедра высокомолекулярных соединений и нефтехимии НИ ТГУ, Томск

Технологическая платформа «Технологии добычи и использования
углеводородов», Москва

Технологическая платформа «Глубокая переработка углеводородных
ресурсов», Москва

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель

АЛТУНИНА Любовь Константиновна, Томск, Россия

Сопредседатель

ВОСМЕРИКОВ Александр Владимирович, Томск, Россия

Заместитель председателя

КРАСНОЯРОВА Наталья Алексеевна, Томск, Россия

Члены оргкомитета

Андреев Д.В. , Пермь, Россия	Максимов А.Л. , Москва, Россия
Дьяконов В.А. , Уфа, Россия	Носков А.С. , Новосибирск, Россия
Каширцев В.А. , Новосибирск, Россия	Телин А.Г. , Уфа, Россия
Кемалов А.Ф. , Казань, Россия	Чесноков Н.В. , Красноярск, Россия
Конторович А.Э. , Новосибирск, Россия	Чертенков М.В. , Москва, Россия
Лавренев А.В. , Новосибирск, Россия	Лакатош И. , Мишкольц, Венгрия
Лихолобов В.А. , Омск, Россия	Цэвээнжав Д. , Улан-Батор, Монголия

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели:

Лихолобов В.А., ИППУ СО РАН, Омск, Россия

Коваленко Е.Ю., ИХН СО РАН, Томск, Россия

Заместитель председателя:

Мин Р.С., ИХН СО РАН, Томск, Россия

Члены комитета:

Головко А.К. - ИХН СО РАН,

Томск, Россия

Коботаева Н.С. - ИХН СО РАН,

Томск, Россия

Манжай В.Н. - ИХН СО РАН,

Томск, Россия

Савиных Ю.В. - ИХН СО РАН,

Томск, Россия

Сагаченко Т.А. - ИХН СО РАН,

Томск, Россия

Чешкова С.В. - ИХН СО РАН,

Томск, Россия

ИСПОЛНИТЕЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:

Красноярова Н.А. ИХН СО РАН, Томск, Россия

Ученый секретарь:

Свириденко Н.Н. ИХН СО РАН, Томск, Россия

Члены комитета:

Коваленко Е.Ю.

Кожевников И.С.

Воронцовская Н.Г.

Харькова Н.С.

Овсянникова В.С.

Савинова И.А.

Очередько А.Н.

Фофанцева М.В.

Корчагин В.А.

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

Пленарные доклады

DOI: 10.17223/9785946218412/444

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ГЕЛИ И ЗОЛИ ДЛЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И КОМПЛЕКСНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ УВЕЛИЧЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ

¹Алтунина Л.К., ¹Кувшинов В.А., ¹Кувшинов И.В., ¹Стасьева Л.А.,

²Чертенков М.В., ³Андреев Д.В., ³Карманов А.Ю.

¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*

²*ООО «ЛУКОЙЛ-Инжиниринг», г.Москва*

³*Филиал ООО «ЛУКОЙЛ-Инжиниринг» «ПермНИПИнефть» в Перми
alk@ipc.tsc.ru*

Для эффективного освоения трудноизвлекаемых запасов нефти, в том числе высоковязкой нефти, и дальнейшего увеличения ее добычи представляется перспективным широкомасштабное применение новых комплексных технологий увеличения нефтеотдачи, сочетающих базовое воздействие на пласт закачкой воды или водяного пара с физико-химическими методами, увеличивающими охват пласта и коэффициент нефтевытеснения при одновременной интенсификации разработки [1].

В ИХН СО РАН созданы «интеллектуальные» композиции с регулируемой вязкостью, плотностью и щелочностью: термотропные неорганические и полимерные золе- и гелеобразующие композиции, а также нефтевытесняющие композиции на основе поверхностно-активных веществ (ПАВ) для закачки в нефтяные пласты с целью увеличения нефтеотдачи, снижения обводненности добывающих скважин и интенсификации добычи нефти в осложненных условиях эксплуатации [1, 2]. В развитие этих работ создана многофункциональная химическая композиция на основе ПАВ с регулируемой вязкостью и щелочностью, низким межфазным натяжением и высокой буферной емкостью в диапазоне 2.5-10 ед. рН, высокой нефтевытесняющей способностью в области температур 20-250 °С, низкозастывающая, совместимая с минерализованными пластовыми водами, увеличивающая проницаемость пластов-коллекторов. В 2019 г. планируются ее промысловые испытания.

В последние годы созданы новые наноструктурированные гелеобразующие композиции для ограничения водопритока и увеличения нефтеотдачи при заводнении и паротепловом воздействии с двумя гелеобразующими компонентами – полимерным и неорганическим, образующие непосредственно в пласте связнодисперсные наноразмерные структуры типа «гель-в-геле» с улучшенными реологическими характеристиками и структурно-механическими свойствами. Высокотемпературная (60-200 °С) гелеобразующая композиция на основе системы «соль Al – простой эфир целлюлозы – карбамид – вода» при нагревании, за счет фазового перехода, сначала образует полимерный гель, а затем внутри него по механизму гидролитической поликонденсации, инициируемой продуктами гидролиза карбамида, возникает гель гидроксида Al, то есть связнодисперсная наноразмерная структура типа «гель-в-геле». Новая низкотемпературная (20-40 °С) гелеобразующая композиция на основе системы «поливиниловый спирт – полиол – многоосновная кислота – соль Al – карбамид – алифатический амин – вода» в пласте также образует связнодисперсные наноразмерные структуры типа «гель-в-геле».

Успешно проведены опытно-промышленные испытания композиций на Усинском месторождении высоковязкой нефти, республика Коми. Композиции эффективно блокируют поступление воды в добывающую скважину. После их закачки наблюдалось снижение обводненности на 12-40 % и увеличение дебитов по нефти на 116 т/мес. на скважину.

1. Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Стасьева Л.А., Кувшинов И.В. Тенденции и перспективы развития физико-химических методов увеличения нефтеотдачи месторождений тяжелой (обзор) // Химия в интересах устойчивого развития. – 2018. – Т. 26. – № 3. – С. 261-277.

2. Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Кувшинов И.В., Стасьева Л.А., Чертенков М.В., Шкрабюк Л.С., Андреев Д.В. Физико-химические и комплексные технологии увеличения нефтеотдачи пермокарбонатной залежи высоковязкой нефти Усинского месторождения // Нефтяное хозяйство. – 2017. – № 7. – С. 26–29.

DOI: 10.17223/9785946218412/445

**КАТАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В НЕФТЕДОБЫЧЕ И ПЕРЕРАБОТКЕ
НЕТРАДИЦИОННОГО УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ**

Носков А.С., Казаков М.О., Добрынкин Н.М.

Федеральный исследовательский центр

«Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН», Новосибирск, Россия

bic@catalysis.ru

Запасы нетрадиционного углеводородного сырья (тяжелой нефти, битуминозных песков и углеродистых сланцев) значительно превышают ресурсы традиционной нефти. Это ставит задачу разработки методов вовлечения нетрадиционного сырья в нефтепереработку.

В представленном докладе приводятся результаты исследования каталитических процессов превращения тяжелых углеводородов (в т.ч. асфальтенов) на неорганических породах нефтяных пластов. Протекание таких каталитических процессов позволяет влиять на вязкость тяжелых нефтей. Окисление легких углеводородов на неорганических матрицах обеспечивает увеличение температуры в нефтяных пластах и также влияет на нефтеотдачу. В докладе приводятся экспериментальные данные о процессах каталитического окисления углеводородов на неорганических породах.

Особое внимание в докладе уделено процессам гидрогенизации битуминозных пород и углеродистых сланцев. Показано, что процессы гидрогенизации эффективно протекают при их обработке водородом.

Неорганические матрицы битуминозных пород и углеродистых сланцев выполняют роль катализаторов, что обеспечивает практически полное превращение тяжелого углеводородного сырья в среднестиллятные нефтяные фракции и вакуумный газойль. В ходе таких процессов также происходит снижение содержания серы в 2,5-3 раза.

Полученные результаты могут служить основой для разработки новых процессов переработки битуминозных пород и углеродистых сланцев.

DOI: 10.17223/9785946218412/446

НОВАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ ДОКТРИНА В НЕФТЕГАЗОВОЙ ГЕОЛОГИИ

Запивалов Н.П.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука
Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия
ipgg@ipgg.sbras.ru*

Нефтегазонасыщенный пласт представляет собой целостную систему двух взаимосвязанных подсистем: породы (минералы) и флюиды (нефть, газ, вода). Залежь нефти – это «живая» флюидопородная система, свойства и параметры которой способны быстро изменяться в непрерывном режиме под действием природных и техногенных факторов в соответствии с законами спонтанной саморегуляции. Залежь нефти может сформироваться, расформироваться и вновь образоваться. Запасы нефти и газа могут быстро восполняться либо за счет вновь образующихся углеводородных масс внутри системы, либо за счет дополнительного притока из других частей земной коры. Поэтому, как подтверждают данные в разных регионах мира, многие нефтегазовые скопления являются молодыми [1].

В результате многолетней научной и практической работы в нефтяной геологии автор пришел к следующим принципиальным выводам:

- Углеводороды встречаются повсеместно и будут всегда.
- Нафтидогенез имеет очаговый характер; никаких особых региональных нефтематеринских пластов нет.
- Критический порог возмущения флюидонасыщенной системы определяется величиной депрессии на пласт: $P_{nl} - P_{заб} \leq 5 \div 8 \text{ МПа}$ [2].
- Формула энергетического состояния залежи: $dT/dP = 1/S_v$; S_v – плотность энтропии [1].
- Предложена концепция реабилитационных циклов для восстановления энергетического потенциала системы [2].

Следует сосредоточить усилия для извлечения остаточной (трудноизвлекаемой) нефти. Ее количество сейчас достигает 55-70% от разведанных запасов. Для этого необходимы принципиально новые концепции и технологии [3].

В разведке и добыче нефти много неопределенностей и рисков. Их можно символически описать следующим образом: $P = Ч + Г_1 + Г_2 + Г_3 + Т_1 + Т_2 + Э + К + Ф + П$, где Ч – человеческий фактор: профессионализм кадров всех уровней, включая менеджмент; $Г_1, Г_2, Г_3$, – геологическая, геофизическая и географическая информация в полном объеме, с обобщающими моделями; $Т_1, Т_2$ – техника и технология с учетом инновационных методик и систем эффективного управления производственными процессами; Э, К – экологические факторы, природные катастрофы; Ф – финансовые возможности; П – политические факторы. Снижению рисков будет способствовать организация опытных нефтяных полигонов, позволяющих осуществлять комплексное натурное моделирование [4].

1. Запивалов Н.П., Попов И.П. Флюидодинамические модели залежей нефти и газа. – Новосибирск: Гео, 2003. – 198 с. – ISBN 5-7692-0616-0.
2. Запивалов Н.П. Динамика жизни нефтяного месторождения // Известия Томского политехнического университета. – Томск: 2012. – Т. 321. – № 1. – С. 206–211.
3. Zapivalov N.P. Improved Oil Recovery vs. Enhanced Oil Recovery. In: Enhanced Oil Recovery: Methods, Economic Benefits and Impacts on the Environment. – Editors: Alicia Knight. – Nova Publishers, Inc., New-York, 2015. – Pp.81-94. – ISBN: 978-1-63463-943-9.
4. Запивалов Н.П. Как лечить «уставшие» месторождения // Недра и ТЭК Сибири: информационно-аналитический отраслевой журнал. – 2019. – № 4, с. 22-24.

DOI: 10.17223/9785946218412/447

ПАРАДОКСЫ ФИЗИКО-ХИМИИ НЕФТЯНОГО ПЛАСТА

Телин А.Г.

*Общество с ограниченной ответственностью
«Уфимский Научно-Технический Центр», Уфа
TelinAG@ufntc.ru*

В докладе будут представлены результаты работ по фильтрации эмульсий, а также сшитых полимерных систем, не подчиняющиеся закону линейной фильтрации Дарси. Показано, что в случае, когда имеют место химические превращения фильтрующихся жидкостей, меняющие их физические свойства (такие, как вязкость, пластичность, упругость, адсорбционная способность), отклонения от линейного закона весьма существенны [1, 2]. Также при фильтрации в пористой среде активные жидкости (кислоты, щёлочи) кардинально меняют структуру порового пространства. Кроме того, растворение горной породы, осаждение твёрдых частиц при солеобразовании – всё это изменяет во времени коэффициент проницаемости.

В нефтепромысловой практике закачка активных жидкостей происходит повсеместно, что требует учёта подобных нелинейных эффектов в дизайне обработки скважин и в определении эффективности технологии.

С позиции механохимии объясняются сверханомалии вязкости гелевых структур и эффект селективности по проницаемости при их закачке для выравнивания профиля приёмистости.

Рассматриваются вопросы фильтрации нефти и воды в сверхнизкопроницаемых коллекторах, также не подчиняющиеся линейному закону Дарси [3].

Все экспериментальные данные получены при физическом моделировании на натуральных кернах с соблюдением пластовых условий, на идеальной модели трещины, а также ячейке Хили-Шоу.

1. Ахметов А., Телин А., Глухов В., Мавлетов М., Силин М., Гаевой Е., Магадов Р., Хлобыстов Д., Байкова Е. Особенности течения высококонцентрированных обратных водонефтяных эмульсий в трещинах и пористых средах // Технологии ТЭК. - №4. – 2003. - С. 54-58.
2. Ф. Э. Сафаров, Е. И. Гусарова, Д. В. Каразеев, И. Р. Арсланов, А. Г. Телин, В. А. Докичев. Получение гидрогелей полиакриламида для ограничения водопритоков при разработке нефтегазовых месторождений // ЖПХ. - 2018. - Т. 91, № 5. - С. 755-759.
3. В. А. Байков, А. В. Колонских, А. К. Макатров, М. Е. Политов, А. Г. Телин, А. В. Якасов. Нестационарная фильтрация в сверхнизкопроницаемых коллекторах при низких градиентах давлений // Нефтяное хозяйство. - № 10. – 2013. – С. 52-56.

DOI: 10.17223/9785946218412/448

AGE OF CHEMISTRY IN OIL AND GAS RECOVERY

^{1,2}Lakatos I., ¹Lakatos-Szabo J., ^{1,2}Szentes G.

¹Research Institute of Applied Earth Sciences, University of Miskolc

²HAS/UM Geoengineering Research Group, Miskolc, Hungary

As the worldwide oil and gas consumption continues to grow, we are facing with unprecedented challenges: how will we be able to meet the world hydrocarbon demand throughout the 21st century. Although the present dominance of fossil fuels will be much less in the future, the hydrocarbons will probably remain indispensable for the humankind. Unfortunately, the recovery rate of conventional hydrocarbons is unacceptably low (~35%) at present and its improvement is highly limited using traditional production technologies. Under these circumstances, the basic alternatives are the following: further increase of recovery efficiency and replace of conventional hydrocarbons with unconventional ones. Despite attractive features of the later alternative (shale/tar sand oil, shale/tight sand gas, hydrates and CBM) it is a stunning circumstance that the recovery efficiency of unconventional hydrocarbons is often less than 10%.

Numerous, and gradually increasing number of papers prove that wider and routine application of advanced chemical methods will become inevitable part of production methods in the coming years, and emblematic authors postulate that all intensive technology are partly or fully based on chemical mechanisms. Since the present comprehension and interpretation of recovery methods seems to be obsolete and patchy, new interdisciplinary approach is necessary to step forward smart flooding and stimulation technologies, and chemistry, more exactly *oilfield chemistry* will play a fundamental role to realize those goals. Oilfield chemistry is a multidisciplinary branch of sciences integrating the knowledge of reservoir engineering, production engineering chemistry, and chemical engineering and many more. Mission of oilfield chemistry is to increase the recovery efficiency up to a possible ultimate limit making available the explored hydrocarbon resources and thus, meeting the global demand of humankind as long as possible. This new branch of engineering science deals with special and unique feature in respect to the source of problems, scientific approach, development, and practical application of technologies. Oilfield chemistry is focusing on processes taking place

- at high pressure and temperature,
- in multiphase (oil/water/gas/rock) systems,
- in heterogeneous porous and fractured reservoirs, and
- under dynamic conditions.

The oilfield chemistry already became a core element of exploration (geochemistry), drilling (mud chemistry), stimulation (fracturing, acidizing, bottomhole clean-up), productivity and injectivity improvement (chemical selective shutoff and conformance treatment), mitigation of formation damage (scale and corrosion chemistry, paraffin and asphaltene removal). In addition, IOR/EOR chemistry (chemical, gas and thermal and microbial methods), water management (water chemistry), phase separation and enrichment in surface facilities (emulsion and suspension breaking) are also part of enhanced chemical methods. Further, chemistry also has fundamental role in recovery of unconventional hydrocarbons by leaching and extraction of heavy oils and bitumens, tapping gas from tight sand shale reservoirs and basin concentrated gas accumulation, methane production from coal seams, chemical decomposition of hydrates, etc. All these areas will be addressed in the presentation focusing on the state-of-the-art and the predicted importance of chemicals and chemical technologies in the coming years. In addition a brand new classification of enhanced methods will be discussed using thermodynamic approaches. Namely, it will be indicated that "Age of Chemistry" is already alive, and chemistry will have a strong and beneficial effect on innovation of the upstream sector of the petroleum industry.

DOI: 10.17223/9785946218412/449

ПЕРЕРАБОТКА НЕФТИ: ПРОШЛОЕ И НАСТОЯЩЕЕ

Лавренов А.В., Булучевский Е.А., Карпова Т.Р., Непомнящий А.А., Федорова Е.Д.

Центр новых химических технологий Института катализа СО РАН, Омск

lavr@ihcp.ru

Сегодня нефть составляет основу энергетики и ряда других отраслей мировой промышленности, в том числе и российской. При этом моторные топлива являются основными продуктами переработки нефти, составляя 50-80% от общего объема продукции нефтеперерабатывающих заводов. В XXI веке нефтепереработка претерпевает значительные изменения, обусловленные увеличением глубины переработки нефти, вовлечением нетрадиционных нефтяных запасов, а также повышением качества моторных топлив и масел, в том числе для удовлетворения экологических требований.

Прямая перегонка долгое время была единственным способом переработки нефти, но с ростом потребности в бензине ее эффективность (выход бензина составлял 20-25 мас%) перестала удовлетворять существующий спрос. В конце XIX - начале XX в.в. был разработан процесс термического крекинга нефти, позволивший увеличить выход бензина до 70 мас%. С этого времени началась эпоха вторичных процессов нефтепереработки, таких как каталитический крекинг, риформинг, алкилирование и др., позволивших значительно улучшить не только выход, но и качество моторных топлив.

Повышение внимания к экологической безопасности товарных бензинов и дизельных топлив, связанной с ограничениями на содержание в них ароматических углеводородов и соединений серы, вызвало увеличение спроса на такие процессы нефтепереработки, как олигомеризация легких алкенов C₂-C₄, алкилирование изобутана и др. Дополнительные возможности получения компонентов экологически чистых моторных топлив связаны с процессами гидроизомеризации бензолсодержащих нефтяных фракций.

В промышленных процессах олигомеризации пропилена и бутенов, а так же алкилирования изобутана алкенами используются кислотные катализаторы («твердая фосфорная кислота», сульфоновые смолы, H₂SO₄, HF), которые обладают рядом принципиальных недостатков, а именно ограниченной регенерацией, низкой термостабильностью, токсичностью и коррозионной агрессивностью. В качестве перспективных гетерогенных кислотных и полифункциональных катализаторов для олигомеризации алкенов C₂-C₄, алкилирования изобутана бутенами, а также гидроизомеризации бензолсодержащих бензиновых фракций могут быть использованы материалы на основе анион-модифицированных оксидов металлов, в частности борат- и сульфатсодержащие оксиды алюминия и циркония, а также их композиции. Преимуществами использования подобных катализаторов помимо активности и селективности могут быть простота получения в промышленных условиях, низкая стоимость и термическая стабильность, обеспечивающая возможность проведения многократной окислительной регенерации.

Работа выполнена в рамках государственного задания ЦНХТ ИК СО РАН в соответствии с Программой фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы по направлению V.46, проект № V.46.2.5 (номер госрегистрации в системе ЕГИСУ НИОКТР АААА-А17-117021450096-8).

DOI: 10.17223/9785946218412/450

**НАУЧНЫЕ АСПЕКТЫ ПОЛУЧЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО
ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА**

Лихолобов В.А.

Федеральный исследовательский центр

Институт катализа им.Г.К.Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

likholobov47@mail.ru

В современном представлении технический углерод является углеродным наноматериалом, построенным из углеродных наноразмерных глобул диаметром от 10 до 100 нм, образованных из углеродных кластеров графитоподобной структуры, при этом углеродные наноглобулы могут срастаться в гроздья (агрегаты), содержащие до нескольких сотен таких глобул. Свойства этого материала зависят от размера наноглобул, формы агрегатов (нитевидные, разветвленные), числа глобул вокруг определенной глобулы (т.н. координационного числа) и от ряда других параметров (например, субструктурных характеристик первичных наноглобул, концентрации на поверхности кислородсодержащих функциональных групп и др.). Определяющими в формировании этих свойств являются условия синтеза технического углерода из углеводородов путём их окислительного пиролиза – высокие, порядка 1300 – 1700 °С, температуры и малые, порядка нескольких миллисекунд, времена контакта, не позволяющие варьировать в широких пределах потребительские свойства образующихся углеродных материалов. Поэтому, для расширения областей применения технического углерода в синтезе функциональных материалов необходимо разрабатывать методы т.н. «постреакторной» обработки (функционализации) частиц технического углерода путём их i) поверхностного или объёмного низкотемпературного модифицирования или ii) воздействия на них мощных источников энергии.

В докладе рассмотрены результаты исследований по функционализации технического углерода разных марок с целью создания современных материалов для различных областей применения. Рассмотрены: а) углеродные пигменты – класс специальных марок наноглобулярного углерода, обладающие свойством окрашивания поверхности в составе водных или масляных суспензий, или объёма - путём компаундирования; б) углеродные аэрогели – новый класс низкоплотных углеродных материалов, обладающих очень высокой пористостью, вследствие чего они перспективны для создания абсорбентов (например, для ликвидации разливов нефти), теплоизоляторов, шумопоглощающих материалов и др., в) углеродные медицинские сорбенты с «настроенными» биоспецифическими свойствами для борьбы с патогенными микроорганизмами с развитой устойчивостью к антибиотикам и антимикотинам (т.е. борьбы с антибиотикорезистентными штаммами), г) углеродные материалы, сочетающие в себе одновременно и высокую удельную поверхность, и высокую электропроводность, для электродов автономных электрохимических систем получения и хранения энергии (батареи, аккумуляторы, суперконденсаторы, топливные элементы и др.), д) материалы, построенные из углеродных оболочечных наночастиц с внутренними полостями, образующихся при воздействии на исходные глобулярные частицы технического углерода импульсного или непрерывного пучка электронов различной энергии вплоть до релятивистских (для электрокаталитических и сенсорных систем и др.).

DOI: 10.17223/9785946218412/451

Нелинейная мезомеханика материалов для арктических приложений

^{1,2}Панин В.Е., ¹Егорушкин В.Е.,

¹Сурикова Н.С., ¹Деревягина Л.С., ^{1,2}Панин С.В.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

²*Национальный исследовательский Томский Политехнический Университет, Томск, Россия*

paninve@ispms.tsc.ru

1. В общепринятой мезомеханике материалов рассматриваются трансляционно-ротационные моды пластической деформации в иерархии масштабов [макро-микро]. В настоящей работе теоретически и экспериментально показано, что в мезомеханике арктических материалов принципиально важную роль играет однородно распределенная кривизна кристаллической решетки и трансляционно-ротационные моды пластического течения в интервале мезомасштабов [микро-нано] механизмом пластической дисторсии.

2. Разработана нелинейная калибровочная теория самосогласованного развития пластических ротаций на мезоскопических масштабных уровнях, учитывающая кривизну решетки и роль электронной подсистемы на наномасштабном уровне. Самоорганизация мезоскопических трансляционно-ротационных мод пластического течения в широком интервале масштабов [макро-нано] лежит в основе высокоэффективных релаксационных процессов в арктических материалах в условиях низких температур.

3. Проведено систематическое экспериментальное исследование механического поведения арктических сталей с ОЦК и ГЦК структурами, в которых создано однородное распределение кривизны решетки. Показано сохранение высокой ударной вязкости материалов до температур минус 70°C, когда сталь с ОЦК структурой разрушается хрупко. Наномасштабная мезосубструктура в зонах кривизны решетки многократно повышает усталостную долговечность арктических сталей и исключает их хладноломкость.

Благодарности. Работа выполнена в рамках Программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 гг» Минобрнауки РФ; Соглашение № 05.583.21.0089, идентификатор проекта RFMEFI58318X0089.

1. Panin V.E., Egorushkin V.E., Elsukova T.F., Surikova N.S., Pochivalov Y.I., Panin A.V. Multiscale Translation-Rotation Plastic Flow in Polycrystals. In: Schmauder S., Chen CS., Chawla K. et al (eds) Handbook of Mechanics of Materials. Springer, Singapore https://doi.org/10.1007/978-981-10-6855-3_77-1.

2. Sih G.C., Panin V.E., Panin S.V. Multiscale mesomechanics of spacetime directional variance of energy absorbed and expelled // Physical Mesomechanics. – 2018. – Vol. 20. – No 4.

Секция А. Физико-химические
и микробиологические методы увеличения
нефтеотдачи, газо-и конденсатоотдачи, в том
числе для месторождений с трудно извлекаемыми
запасами. Новые технологии обработки
призабойной зоны нефтяных и газовых скважин.
Проблемы добычи, подготовки и транспорта
высоковязких и высокопарафинистых нефтей,
проблемы освоения нефтегазовых месторождений
Арктического региона.

DOI: 10.17223/9785946218412/452

ВЯЗКОУПРУГИЕ ЖИДКОСТИ ДЛЯ НЕФТЕДОБЫЧИ

Дмитриева З.Т.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
ztd@ipc.tsc.*

В нефтяной индустрии вязкоупругие жидкости (ВУЖ) используют в технологических процессах: гидравлического разрыва газо- и нефтеносных пластов, бурения скважин, изоляции призабойной зоны пласта [1-2]. ВУЖ по требованиям технологий должны быть тиксотропными и термотропными. Главное требование, – экономическая и сырьевая доступность ВУЖ. Обнаружен неизвестный ранее эффект значительного увеличения динамической вязкости и термомеханической стабильности водомасляных эмульсий, полученных в присутствии сверхкритического (избыточного) содержания воды, в сравнении с тем же составом эмульсий, приготовленных в условии равновесного количества воды. Наблюдается закономерность в изменении состава эмульсий, - чем больше избыток воды задаётся экспериментом, тем меньше её эмульсируется с маслом (10W30, табл.). Например, вязкость эмульсий 8 и 12 изменяется: 342.4 и 549.7 Па*с (50⁰С); 330.2 и 526.0 Па*с (70⁰С). Они текут при сдвиговом напряжении 200 – 280 Па без изменения вязкости. В этих же условиях эмульсии 21 и 25 текут при напряжении 200 – 280 Па с уменьшением вязкости на 30 - 45 %. Экспериментально найдена аналогичная закономерность в увеличении вязкости и стабильности эмульсий, полученных на основе масел: Камаз, Автол, М8В, И-12 – И-40, 5W40, Rimula D, Shell в условии сверхкритического содержания воды в процессе эмульсации. Технология увеличения вязкости и стабильности водомасляных эмульсий не отягощена применением дорогостоящих и токсичных реагентов.

Таблица. Вязкость эмульсии в зависимости от способа её получения при 20⁰С

Эмульсия	Кол-во воды, взятое в эмульсацию, %мас.	Кол-во воды, вошедшее в эмульсию, %мас.	Вязкость эмульсии с избытком воды, Па·с	Эмульсия	Вязкость эмульсии с равновесным кол-ом воды, Па·с
1	86.0	62.3	232.4	14	40.6
2	85.7	65.4	323.6	15	55.8
3	85.6	64.9	330.8	16	52.6
4	85.5	63.2	349.3	17	75.9
5	85.4	63.1	344.6	18	71.5
6	85.0	71.0	357.0	19	73.6
7	84.7	72.0	331.0	20	86.0
8	84.5	76.2	340.0	21	105.2
9	84.0	78.5	346.0	22	190.0
10	83.0	80.3	405.0	23	297.3
11	82.9	81.0	389.7	24	378.0
12	82.7	82.0	548.5	25	451.0
13	82.5	82.5	595.0	26	595.0

1. Каневская Р.Д. Зарубежный и отечественный опыт применения гидроразрыва пласта. М.: ВНИИОЭНГ, 1998. - 40 с.
2. Tudor R., Poleschuk A. Low-viscosity, low-temperature fracture fluids // J. Canad. Petrol. Technol. – 1996. – Vol. 35. - № 7. – P.31-36.

DOI: 10.17223/9785946218412/453

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЙ С ДОБАВКАМИ ПОЛИМЕРОВ

Манжай В.Н., Фуфаева М.С.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
maria81@ipc.tsc.ru

Добыча и транспорт продукции от добывающих скважин до установок подготовки нефти осуществляется в подавляющем большинстве случаев в виде водонефтяной эмульсии. При разработке месторождений с высоковязкой нефтью, аномальные свойства которой обусловлены высоким содержанием асфальтенов, смол и парафинов, эмульсии чаще всего являются «обратными» системами (В/М). Для технологически грамотной перекачки таких эмульсий требуется максимально полная информация об их реологических свойствах.

На устойчивость и специфические свойства эмульсий существенное влияние также оказывает и присутствие синтетических полимеров. Высоковязкие нефти и их «обратные» эмульсии с добавками полимеров обладают неньютоновскими свойствами (рис. 1 и 2).

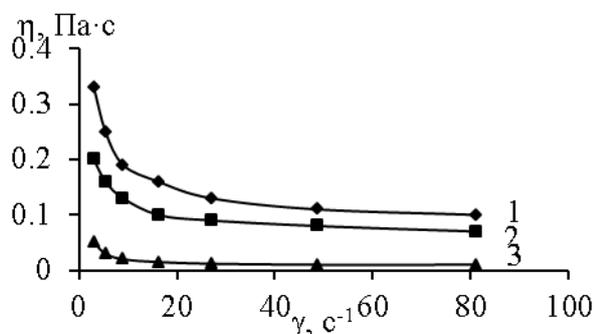


Рис. 1 – Зависимость динамической вязкости от скорости сдвига при $T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ для различных систем:

1. Эмульсия В/М (50% нефти и 50% воды);
2. Эмульсия В/М (10% нефти и 90% воды);
3. Обезвоженная нефть (при $\dot{\gamma} \rightarrow 100\text{ с}^{-1}$, вязкость $\eta \sim 10\text{ мПа}\cdot\text{с}$ и $\rho = 850\text{ кг/м}^3$)

Содержание в нефти ВМС:

Асфальтены – 3%; Смолы – 8%;

Парафины – 2 %

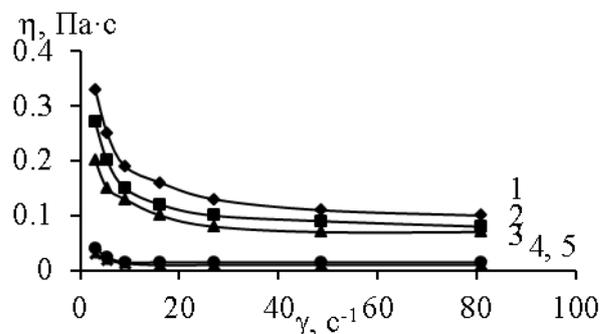


Рис. 2 – Зависимость динамической вязкости от скорости сдвига при $T = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ для различных систем:

1. Эмульсия В/М (50% нефти и 50% воды);
2. Эмульсия В/М (50% нефти и 50% воды) с добавкой полиакриламида ПАА ($0,02\text{ кг/м}^3$);
3. Эмульсия В/М (50% нефти и 50% воды) с добавкой полигексена ПГ ($0,02\text{ кг/м}^3$);
4. Раствор ПГ в нефти ($0,02\text{ кг/м}^3$);
5. Раствор ПАА в воде ($0,02\text{ кг/м}^3$)

Интересной особенностью эмульсий с малыми добавками полимеров является экспериментально наблюдаемый факт не увеличения, а наоборот, уменьшения вязкости таких эмульсий (рис. 2, кривые 2 и 3). Причиной тому является то, что полимерные макромолекулы являются флокулянтами смол и асфальтенов (ВМС нефти) и выводят их из дисперсионной среды эмульсии в поверхностный слой стабилизированных капель воды (рис. 4 и 5 – черная окантовка капель воды), тем самым снижая вязкость коллоидной системы.

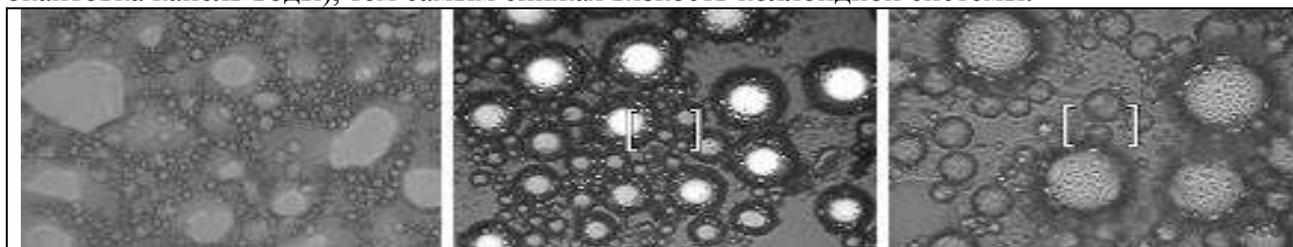


Рис. 3 – Водонефтяная эмульсия (50% нефти и 50% воды)

Рис. 4 – «Обратная» эмульсия В/М (50% нефти и 50% воды) + ПАА

Рис. 5 – «Обратная» эмульсия В/М (50% нефти и 50% воды) + ПГ

DOI: 10.17223/9785946218412/454

ИЗУЧЕНИЕ СОВМЕСТНЫХ ОТЛОЖЕНИЙ ГИДРАТА МЕТАНА И КОМПОНЕНТОВ НЕФТИ МЕТОДОМ «ХОЛОДНОГО СТЕРЖНЯ»

^{1,2,3}Стопорев А.С., ^{1,2}Манаков А.Ю.

¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения
Российской академии наук, Новосибирск, Россия*

²*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет», Россия, Новосибирск*

³*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина», Москва, Россия
stopor89@bk.ru*

Газовые гидраты – это соединения включения, в которых каркас хозяина, образованный молекулами воды, включает гостевые молекулы (метан, этан, пропан, углекислый газ и т. д.) [1]. Предотвращение образования гидратов является актуальной задачей при добыче и транспортировке многофазных потоков нефть–газ–пластовый рассол. Понимание взаимодействия гидратов с компонентами нефти при промысловых условиях на более детальном уровне требуется для разработки эффективных способов борьбы с твердыми отложениями (гидрат–АСПО; их предупреждение и ликвидация) в подобных системах. Поскольку нефть представляет собой сложную смесь, необходимо выяснить, какие именно компоненты нефти могут адсорбироваться на поверхности газогидрата и склонны образовывать с ним совместные отложения. Хотя многие соединения образуют гидраты кубической структуры I или II подобно метану или попутному нефтяному газу, соответственно, механизм образования гидратов и их поверхностные свойства могут значительно различаться в зависимости от типа гидратообразователя. Ранее подобные исследования проводились на модельных гидратах (например, гидрат фреона [2]), которые позволяют проводить исследования при атмосферном давлении. Представляет значительный интерес установить зависимость типа адсорбируемых и совместно выпадающих с гидратом соединений нефти от структуры гидрата и гидратообразующего агента. Нами была разработана и изготовлена установка для получения агломератов гидрата и нефтяных компонентов, позволяющая решать указанные выше задачи. Установка представляет собой «холодный стержень», способный работать в среде с высоким газовым давлением. Насколько нам известно, подобных исследований с гидратами метана и природного газа ранее не проводилось. Методика эксперимента была разработана и апробирована на гидрате метана. Более детальные исследования предполагается выполнить в дальнейшем.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект 17-17-01085).

1. Sloan E. D., Koh C. A. Clathrate Hydrates of Natural Gases. – CRC Press (Taylor and Francis Group): Boca Raton, 2008. – 752 p.
2. Borgund A.E., Høiland S., Barth T., Fotland P., Askvik, K.M. Molecular analysis of petroleum derived compounds that adsorb onto gas hydrate surfaces // Applied Geochemistry. – 2009. – № 24. – P. 777–786.

DOI: 10.17223/9785946218412/455

СПОСОБ ОЦЕНКИ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЯЗКОУПРУГИХ КРИОГЕЛЕЙ

Фуфаева М.С., Манжай В.Н., Алтунина Л.К.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

maria81@ipc.tsc.ru

Решение задачи освоения природных ресурсов Арктики осложняется экстремальными климатическими условиями, предъявляющими повышенные требования к используемым технологиям и материалам. Перспективным конструкционным материалом для разработки новых технологий обустройства и ремонта добывающих скважин, у которых вследствие выхода на поверхность теплой нефти образуются приустьевые воронки (провалы грунта), являются криогели.

Водные растворы поливинилового спирта (ПВС) после замораживания ($T < 0$ °С) и последующего их оттаивания в области положительных температур переходят из вязкотекучего состояния в упругие полимерные тела – криогели, способные к большим обратимым деформациям. Свойства твердых тел принято оценивать модулем упругости (G). Упругие свойства криогелей исследовали на установке, принцип работы которой основан на реологической модели Максвелла (рис. 1). Результаты представлены на рис. 2

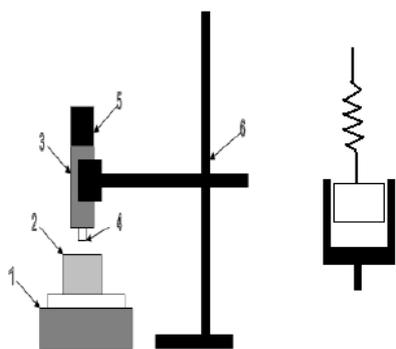


Рис. 1 – Установка, функционирующая на основе реологической модели Максвелла $\tau = \tau_0 \cdot \exp(-t/\theta)$

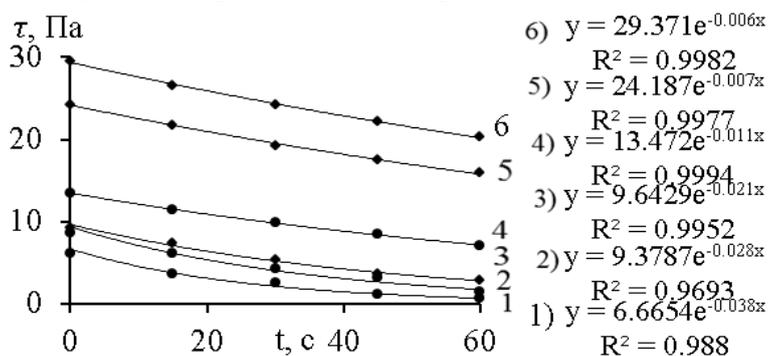


Рис. 2 – Зависимость напряжения от времени в криогелях, на основе растворов ПВС ($M = 75 \cdot 10^3$). Концентрация ПВС: 1 – 5 %; 2 – 6 %; 3 – 7 %; 4 – 8 %; 5 – 9 %; 6 – 10 %.

При проведении экспериментов исследователи для каждого конкретного образца получают изменяющуюся во времени величину значения напряжения (τ), поэтому при расчете модуля упругости по формуле Гука $G = \tau/\eta$ получают субъективную величину. Но соотношение между вязкостью (η) и упругостью, которое характеризуется величиной времени релаксации $\theta = \eta/G$, более объективно описывает реологические свойства полимерных тел. Значения времен релаксации криогелей, сформированных из двух растворов разной концентрации и молекулярной массы ПВС, представлены на рисунке 3. Из рисунка 3 следует, что величина времени релаксации криогелей независимо от молекулярной массы образцов ПВС (1 – $M_1 = 75 \cdot 10^3$; 2 – $M_2 = 150 \cdot 10^3$) увеличивается при повышении содержания в них макромолекул ПВС. Различные значения времен релаксации ($\theta = \eta/G$) у образцов криогелей с разной молекулярной массой обусловлены большей вязкостью высокомолекулярного образца ($\eta_2 > \eta_1$) по сравнению с низкомолекулярным криогелем.

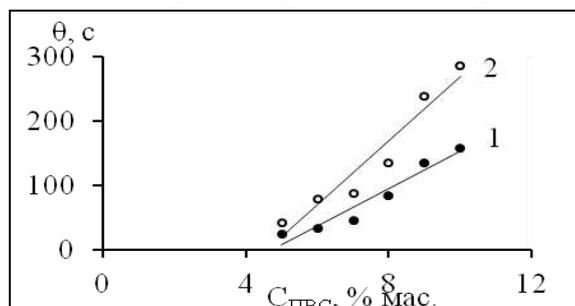


Рис. 3 – Зависимость времени релаксации криогелей от концентрации

DOI: 10.17223/9785946218412/456

ОСОБЕННОСТИ СОСТАВА ДОБЫТЫХ И ОСТАТОЧНЫХ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЕЙ УСИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Чуйкина Д.И., Петренко Т.В., Стахина Л.Д., Савиных Ю.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

VDI@ipc.tsc.ru

Добыча тяжелых нефтей неразрывно связана с применением гидродинамических методов воздействия на продуктивный пласт с целью увеличения нефтеотдачи. В результате этого пластовая нефть выводится из состояния начального термодинамического равновесия между нефтяными компонентами и породой, пластовой водой и т.д., вследствие чего происходит изменение состава подвижной и остаточной пластовой нефти [1]. В связи с этим представило интерес изучения состава добытой и выделенной из кернов остаточной нефти пермокарбонной залежи Усинского месторождения (Республика КОМИ). Остаточная нефтенасыщенность (ОН) образцов кернов определялась путем экстракции их в аппарате Сокслета. Исследование компонентного состава (масла, смолы, асфальтены) образцов добытой нефти показало, что образец из верхнего (ВО) объекта содержит больше масел и меньше смол и асфальтенов, чем из среднего (СО) объекта залежи. В составе остаточной нефти, выделенной из каждого керна, доля масел меньше (на 14 – 25 %%), чем в добытой нефти, а также происходит снижение отношения смолы / асфальтены (табл. 1).

Таблица 1 – Состав добытых и остаточных нефтей

Скважина №, объект	Образец	ОН, % мас.	Содержание, % мас.			Отношение смолы/асфальтены
			масла	смолы	асфальтены	
29XX, ВО	Нефть доб.	-	76,3	17,0	6,7	2,5
	Нефть ост.	4,2	51,2	31,3	17,5	1,8
53XX, СО	Нефть доб.	-	72,0	20,2	7,8	2,6
	Нефть ост.	6,1	57,8	28,6	13,6	2,1

Изучение структурно-группового состава исследуемых образцов с использованием ИК-спектроскопии показало, что нефти, добытые из скважины и остаточные, полученные из кернов, практически не отличаются по содержанию парафиновых структур, длинных алкановых цепей, а также конденсированных аренов. Однако для образцов из скважины 29XX различия в составе добываемой и остаточной нефти более выражены.

В результате исследования устойчивости данных образцов нефти к выпадению асфальтенов с использованием спектрофотометрического метода [2], установлено, что для добытых нефтей скорость осаждения неустойчивых частиц значительно меньше, чем для остаточных, кроме того начало осаждения этих частиц сдвигается на более позднее время. Изучение динамики осаждения асфальтенов также показало, что асфальтены, выделенные из добытой нефти, гораздо устойчивее, чем из остаточной нефти. Это связано с особенностями состава асфальтенов. На основании данных ИК-спектроскопии следует, что асфальтены, выделенные из добытой нефти, характеризуются меньшей степенью ароматичности при большем количестве разветвленных структур, а также содержании длинных алкановых цепей, что объясняет различия в устойчивости.

1. Kayukova G., Aglyamiyev A., Klyamova A., Sitdikova L., Sharipova N., Smelkov V. The composition of rocks and residual hydrocarbons in the flooded-out zones of romashkinskoye field reservoirs // Oil Industry. – 2010. – No 5, P. 100-103.
2. Петренко Т.В., Чуйкина Д.И., Стахина Л.Д. Применение метода спектрофотометрии для исследования устойчивости нефти Усинского месторождения // Химия в интересах устойчивого развития. – 2018. – Т. 26. – № 1. – С. 37–41.

DOI: 10.17223/9785946218412/457

КОНТРОЛЬ ЗА РАЗРАБОТКОЙ МЕСТОРОЖДЕНИЯ ПО ИЗМЕНЕНИЮ СОСТАВА ДОБЫВАЕМОЙ НЕФТИ ПОСЛЕ ПРИМЕНЕНИЯ КОМПЛЕКСНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Стахина Л.Д., Савиных Ю.В., Чуйкина Д.И.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
sl@ipc.tsc.ru*

Ухудшение структуры запасов традиционного сырья приводит к повышенному интересу к разработке залежей высоковязкой тяжелой нефти. Применение тепловых и химических методов увеличения нефтеотдачи может приводить к изменению состава и физико-химических свойств добываемой нефти. В данном сообщении рассмотрены изменения состава тяжелой высоковязкой нефти Усинского месторождения после паротеплового воздействия в совокупности с закачкой нефтевытесняющих и потокоотклоняющих композиций НИНКА и ГАЛКА. Для изучения состава добываемой нефти был использован комплекс методов, включающий метод градиентно-вытеснительной хроматографии, газо-жидкостной хроматографии и ИК-спектроскопии.

Согласно геологическому профилю месторождения, скважины, расположенные в центральной части месторождения, эксплуатируют все три объекта, характеризующиеся разным составом [1]. Основные различия наблюдаются в содержании парафиновых, нафтеновых и ароматических УВ, что объясняет особенности состава нефтей из разных скважин на данном участке месторождения. Так, нефть нижнего объекта отличается самой высокой вязкостью и практически полным отсутствием н-алканов (1 % отн.). В то время как нефть верхнего объекта маловязкая с высоким содержанием н-алканов (35 % отн.). Нефти среднего объекта занимают промежуточное значение.

После закачки состав добываемых нефтей изменяется в сторону относительного увеличения парафино-нафтеновых углеводородов не более чем в 1,2 раза. Содержание смолисто-асфальтеновых компонентов значительных изменений не претерпело. По результатам, полученным методом ИК-спектроскопии показано, что в составе нефти наблюдается пониженное относительное содержание насыщенных УВ. Это согласуется со всеми полученными ранее данными по составу для нефти - молекулярно-массовое распределение н-алканов, минимальное содержание парафино-нафтеновых углеводородов, высокая плотность и вязкость добытой нефти.

Полученные результаты указывают на то, что под действием применяемых технологий происходит перераспределение фильтрационных потоков внутри пласта с последующим доотмывом более легкой нефти из порового пространства нефтенасыщенного пласта. Значительных изменений в составе исходных нефтей и добытых после применения технологий не наблюдается. Это может быть связано с тем, что продукция скважин представляет собой смесь тяжелой остаточной нефти и более легкой нефти из неохваченных заводнением целиков.

1. Чуйкина, Д.И. Особенности геологического строения залежи Усинского месторождения и состава добываемой нефти / О.В. Серебренникова, Л.Д. Стахина, Л.К. Алтунина // Экспозиция нефть газ. – 2018. – №1. – С. 18-21 (электронный журнал http://runeft.ru/archive/2017/1_2018.htm)

DOI: 10.17223/9785946218412/458

ПРИМЕНЕНИЕ КИСЛОТНОЙ НЕФТЕВЫТЕСНЯЮЩЕЙ КОМПОЗИЦИИ НА СКВАЖИНЕ С ТРЕЩИНОЙ ГИДРОРАЗРЫВА И В КАРБОНАТНОМ ПЛАСТЕ С ЕСТЕСТВЕННОЙ ТРЕЩИНОВАТОСТЬЮ

¹Пеньковский В.И., ¹Корсакова Н.К., ²Алтунина Л.К., ²Кувшинов В.А.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт гидродинамики им. М.А.Лаврентьева отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
penkov@hydro.nsc.ru, alk@ipc.tsc.ru

В работе использована, полученная методами теории упругой фильтрации математическая модель гидравлического разрыва, основанная на понятии растрескивания части пласта, примыкающей к скважине, как гетерогенной, трещиновато-пористой среды [1]. Согласно модели, если разность давления во флюиде достигает некоторого критического значения, то скелет пласта подвергается упруго-пластическому разрушению с образованием трещин. Увеличение объема системы трещин в зоне растрескивания приводит к уменьшению пористости блоков в соответствии с условием совместности деформации поровых объемов. Для величин радиуса растрескивания и раскрытия трещин получены инженерные формулы.

Дебит скважины с гидравлическим разрывом превосходит дебит обычной скважины. Однако эффективность гидравлического разрыва с течением времени падает. Это явление, которое характерно и для карбонатных пластов с естественной трещиноватостью, можно объяснить возрастающим действием капиллярного запираания пластовой воды, скапливающейся у стенок трещин.

Приведенные в данной работе результаты лабораторных исследований на плоской микромоделю пласта показали возможность восстановления дебита скважины с трещиной гидроразрыва путем закачки в неё композиции ГБК, разработанной в Институте химии нефти СО РАН. Композиция ГБК является кислотной нефтевытесняющей композицией на основе ПАВ, аддукта неорганической кислоты и многоатомного спирта. Композиция совместима с минерализованными пластовыми водами, имеет низкую температуру замерзания (минус 20 ÷ минус 60 °С), низкое межфазное натяжение на границе с нефтью и применима в широком интервале температур, от 10 до 230 °С. Композиция растворяет карбонатные породы без образования осадков, отличается пролонгированным действием, обладает водоотнимающей способностью, восстанавливает исходную проницаемость коллектора.

В опытах на плоской модели после достижения установившегося режима фильтрации между нагнетательной и откачивающей скважинами, расположенными в центре модели на определенном расстоянии друг от друга, была произведена импульсная закачка воды, которая привела к переупаковке частиц пористой среды микромоделю с образованием наполненных водой трещин гидроразрыва. С целью интенсификации притока флюидов к скважине была произведена инъекция порции композиции ГБК. Введение композиции привело к коалесценции капель нефти с образованием оторочки на границе проникновения ГБК. В результате дебит скважины постепенно увеличился 5-10 раз и затем стабилизировался.

Приведены результаты промысловых испытаний композиции ГБК на пермо-карбоневой залежи высоковязкой нефти Усинского месторождения с трещиновато-пористым типом породы коллектора.

1. Pen'kovskii V.I., Korsakova N.K. Effect of wave action on near-well zone cleaning. // IOP Conf. SERIES; Journal of Physics: Conf. Series 864. – 2017. – 012072. P. 1-6.
2. Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Кувшинов И.В. Увеличение нефтеотдачи в карбонатных коллекторах. // Neftegaz.RU. – 2017. – № 3. С. 96 – 103.

DOI: 10.17223/9785946218412/459

**ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ УВЕЛИЧЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ
НА ПЕРМО-КАРБОНОВОЙ ЗАЛЕЖИ ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ УСИНСКОГО
МЕСТОРОЖДЕНИЯ**

Кувшинов И.В., Алтунина Л.К., Кувшинов В.А.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук (ИХН СО РАН), Томск, Россия
kiv@ipc.tsc.ru;*

В нефтедобывающей отрасли, как и в любой другой сфере деятельности, есть задача повышения эффективности. Методы увеличения нефтеотдачи (МУН) могут быть самыми разными: технологическими, физическими, химическими, гидродинамическими, даже чисто организационными. Далее речь пойдет о химических, или, несколько шире, физико-химических методах [1]. Основных целей у всех этих методов две. Первая – это увеличение количества добываемой нефти и интенсификация добычи. Так как нефть залегает в пористых или трещиноватых пластах и выкачивается оттуда под давлением, то для увеличения ее добычи необходимо или уменьшить вязкость нефти, повысить ее текучесть, или увеличить проницаемость самого пласта. В случае добычи нефти путем заводнения, т.е. закачки в пласт воды или пара (термическое заводнение), под увеличением добычи можно понимать и увеличение коэффициента вытеснения нефти водой, и ее дополнительного отмывания. В этом случае применяют различные кислотные составы, композиции на основе поверхностно-активных веществ (ПАВ) и щелочей. Вторая проблема, на решение которой нацелены МУН, – это снижение обводненности добываемой нефти. В этом случае необходимы так называемые гель-технологии, химические композиции, которые образуют в пласте водоизолирующий гелевый экран, препятствующий поступлению воды в скважину. Такой экран можно создавать как непосредственно в добывающей скважине для блокирования воды, так и в нагнетательной скважине системы заводнения, чтобы увеличить охват пласта и перенаправить поток закачиваемой воды или пара в еще неохваченные области.

В данном докладе рассматриваются результаты опытно-промышленных работ (ОПР) за 2016-2018 на пермо-карбоневой залежи высоковязкой нефти Усинского месторождения ООО «ЛУКОЙЛ-Коми» совместно ИХН СО РАН, филиалом ООО «ЛУКОЙЛ-Инжиниринг» «ПермНИПИнефть» и ООО «ОСК. Виды работ, рассматриваемые в докладе:

1. Ограничение водопритока (ОВП) с применением композиции с двумя гелеобразующими агентами при пароциклических обработках (ПЦО) и в зоне паротеплового воздействия.
2. ОВП гелеобразующей полимерной композицией для холодных скважин.
3. Комбинированная обработка горизонтальных горячих водонагнетательных скважин несколькими композициями различного назначения.
4. Применение термотропных химических композиций совместно с ПЦО.
5. Применение загущенной нефтевытесняющей композиции при площадной закачке пара.

Технологии с применением термотропных гелеобразующих и нефтевытесняющих композиций показали свою эффективность в промысловых условиях и были рекомендованы для дальнейших опытно-промышленных работ и промышленного внедрения. Точечная обработка одной добывающей скважины дает в среднем 1000-1500 т дополнительно добытой нефти за несколько месяцев. Применение гелей позволяют снизить обводненность на 20-30%. Применение комплексных методов для нагнетательных скважин способно дать значительный эффект по группе реагирующих скважин, который оценивается уже в десятки тысяч тонн дополнительно добытой нефти.

1. Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Стасьева Л.А., Кувшинов И.В. Тенденции и перспективы развития физико-химических методов увеличения нефтеотдачи месторождений тяжелой (обзор) // Химия в интересах устойчивого развития. – 2018. – Т. 26. – № 3. – С. 261-277.

DOI: 10.17223/9785946218412/460

РИСКИ ЗАГРЯЗНЕНИЯ НЕФТЬЮ И НЕФТЕПРОДУКТАМИ АРКТИЧЕСКИХ ТЕРРИТОРИЙ

Алексеева М.Н., Сваровская Л.И., Яценко И.Г.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
amn@ipc.tsc.ru*

Особое место в арктической зоне России занимает шельф Баренцева моря, который характеризуется значительными ресурсами нефти, составляющими 27,6 млрд. т условного топлива, в том числе 2,1 млрд. т нефти. Промышленное освоение в зоне Арктики проходит в сложнейших условиях и требует применения новых уникальных технологий. Недостаточное соблюдение мер по предупреждению аварийных разливов нефти нефтяными компаниями уже привело к масштабному загрязнению окружающей среды Арктической зоны России. Выявление зон экологического риска определит план мероприятий по профилактике возможных аварийных ситуаций.

Так, в районе Баренцево моря в 5 км от побережья о. Колгуев при помощи плавучего нефтепровода загружаются танкеры вместимостью в среднем 30 000 тонн, что повышает риск возникновения нефтяных пятен на поверхности морской воды. Утечки нефти и нефтепродуктов происходят как в штатном режиме эксплуатации нефтеналивного оборудования, так и в результате аварий. По данным от 18 сентября 2004 г. при перевозке дизельного топлива в результате аварии вблизи о. Колгуев (пос. Бугрино) утонул понтон с грузом 50 тонн солянки [1]. В результате аварии 19 сентября 2013 г. возле о. Колгуев в море вылилось 200 литров дизельного топлива. В 2014 г. в результате экспедиционных исследований в этой зоне были отобраны образцы нефтезагрязненной почвы, торфа и растительности. Концентрация загрязнения почвы определена в интервале 18-57 г/кг. Применение аборигенной нефтеокисляющей микрофлоры для восстановления нефтезагрязненных почв позволит охранять нативный микробиоценоз северных почв. Ремедиация углеводородов нефти составила 36-60 % при температуре +5⁰С [2].

Цель данной работы: выявление экологического риска загрязнения нефтью и нефтепродуктами территории и прибрежной зоны о. Колгуев на основе дистанционных и наземных данных.

На основе ГИС технологий с применением КС Landsat 8 и данных наземных исследований были выявлены зоны загрязнения территории и прибрежной зоны о. Колгуев:

1. Определена зона риска площадью около 2,5 км², включающая пос. Бугрино с прилегающим мелководьем.
2. Получена карта-схема зоны риска нефтезагрязнения производственных объектов, составляющая 129 км², включая санитарно-защитные полосы производственных объектов.
3. С использованием продукта MCD 43 A4 в районе морского нефтеналивного причала (терминала) о. Колгуев определена площадь нефтяного пятна около 20 км².

1. Бамбуляк А., Францен Б. Транспортировка нефти из Российской части Баренцева Региона. Экологический Центр. Сванховд, 2005.- 92 с.
2. Altunina L. K., Svarovskaya L. I., Alekseeva M. N., Yashchenko I. G. Integrated assessment of anthropogenic contamination of oil-producing territories in Western Siberia // Petroleum Chemistry. 2014. Т. 54. V. 3. P. 234-238.

DOI: 10.17223/9785946218412/461

**ГРАВИМЕТРИЧЕСКИЙ И ГАЗОХРОМАТОГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОДЫ
ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ПАРАФИНОВ В НЕФТИ, НЕФТЕПРОДУКТАХ,
НЕФТЯНЫХ ОТХОДАХ И ОТЛОЖЕНИЯХ**

Суховерхов С.В., Логвинова В.Б.

ФБУН Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия

svs28@ich.dvo.ru

Определение концентрации парафинов в нефти, нефтепродуктах, нефтесодержащих отходах и отложениях является важной практической задачей. Особенно актуальной эта задача при добыче, первичной подготовке и транспортировке высоковязких и высокопарафинистых нефтей, а также для нефти, идущей на экспорт - по ГОСТ Р 51858 содержание парафинов в ней ограничено 6 %.

Для определения содержания парафинов в нефти, нефтепродуктах и нефтесодержащих отложениях обычно используют гравиметрический (ГОСТ 11851, М 01-12-81, SMS 1769/88) или газохроматографический методы анализа.

В ИХ ДВО РАН разработан новый гравиметрический экспресс-метод определения содержания парафинов в нефти, нефтепродуктах и нефтесодержащих отложениях, позволяющий проводить анализ за 1 день. Предложено для осаждения асфальтенов использовать нефрас С80/120, а очистку от смолистых веществ проводить статическим методом на оксиде алюминия. Для ускоренного удаления растворителей рекомендуется использовать роторный вакуумный испаритель. Вымораживание парафинов осуществляется в течение 1-2 часов при температуре не выше минус 20 °С. Фильтрация выкристаллизовавшихся после вымораживания парафинов проводят под вакуумом. Погрешность разработанной методики 14 - 25 % в зависимости от содержания парафинов. На разработанный гравиметрический экспресс-метод определения содержания парафинов в нефти, нефтепродуктах и нефтесодержащих отложениях получен патент РФ.

При определении концентрации парафинов в нефти, нефтепродуктах и нефтесодержащих отложениях методом газовой хроматографии (ГХ) предложено использовать колонку со специальной поликарборанметил-силоксановой фазой UltraALLOY-DX30, разделение проводить при программировании подъема температуры от 50 °С до 400 °С со скоростью 10 °С/мин. При расчетах парафинами следует считать нормальные и изоалканы от C₂₀ до C₆₀ и выше. В этом случае данные гравиметрического и хроматографического методов анализа парафинов имеют близкие сопоставимые значения для нефти, нефтепродуктов и нефтесодержащих отложений (табл. 1).

Таблица 1 - Содержание парафина в образцах нефти, мазута и АСПО

Образец	Содержание парафина, %	
	Гравиметрический экспресс-метод	ГХ
Нефть из скважины РВ-320	0,30 ± 0,04	0,29 ± 0,15
Нефть из скважины РВ-352	0,64 ± 0,09	0,59 ± 0,15
Нефть из скважины РВ-310	1,16 ± 0,21	0,97 ± 0,40
Нефть из скважины РВ-305	2,61 ± 0,47	2,20 ± 0,40
Мазут марки М-100	5,2 ± 1,04	5,06 ± 0,65
АСПО из V-0937 РАВ-Чайво	40,23 ± 10,06	42,87 ± 11,3
АСПО из V-0937 РАВ-Чайво	50,3 ± 12,58	44,31 ± 11,0

В случае, если при анализе ГХ важно хорошее разделение нормальных и изоалканов рекомендуется использовать колонку с метилсилоксановой фазой UltraALLOY-1(MS/HT), а разделение проводить при программировании подъема температуры от 50 °С до 400 °С со скоростью 3-5 °С/мин.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки, номер гос. задания 0265-2019-0002. Исследования проводились с использованием оборудования ЦКП ДВЦСИ ИХ ДВО РАН.

DOI: 10.17223/9785946218412/462

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГРАВИТАЦИОННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ АСФАЛЬТЕНОВ В ПЛАСТЕ

Охотникова Е.С., Барская Е.Е., Ганеева Ю.М., Юсупова Т.Н., Тимиргалиева А.Х.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова**ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия**ekaterina.okhotnikova@gmail.com*

Нефти представляют собой сложные природные системы, физико-химических свойства и состав которых может изменяться под действием внешних факторов. В работе [1] сделано предположение, что дополнительное поступление в залежь легких углеводородов приводит к неустойчивости асфальтенов и образованию в продуктивном нефтяном пласте их гравитационного градиента. В данной работе смоделирован процесс гравитационного разделения нефти в карбонатном нефтяном коллекторе. Модельная установка (рис. 1) представляет собой вертикальную стеклянную колонку (а) диаметром 2 см и длиной 50 см. Колонка заполнялась нефтенасыщенной породой (карбонатная порода и высоковязкая нефть в соотношении 3:1). Нефтенасыщенная порода была пропитана растворителем (н-гептаном) (из ёмкости б), после чего выдержана в течение месяца. Затем проведено вытеснение нефти с растворителем путем создания в системе перепада давления. В отдельные ёмкости (в) последовательно отобраны образцы нефти 1-5 (1 – нефть, вытесненная с нижней части установки, 5 – с верхней части установки). Определен состав вытесненной нефти (табл. 1). Показано, что образцы 1-5 практически не отличаются по содержанию смол, а в ряду 5→1 содержание масел уменьшается, а содержание асфальтенов увеличивается.

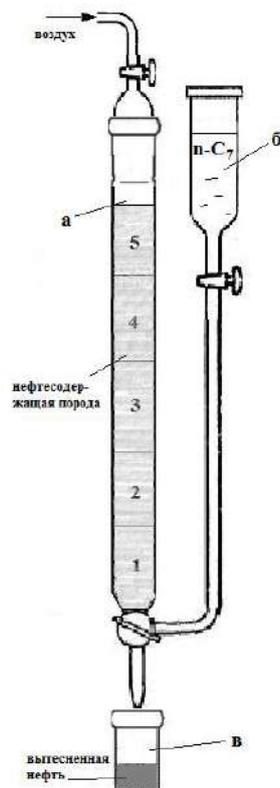


Рисунок 1- Схема модельной установки

Таблица 1 – Компонентный состав вытесненной нефти

Образец	Содержание компонентов, % масс.			
	масла	БС	СБС	асфальтены
5	66,0	21,8	11,2	1,0
4	62,1	23,6	11,9	2,4
3	63,9	22,2	10,2	3,7
2	62,2	22,8	11,0	4,0
1	61,1	22,0	11,6	5,3

Асфальтены, выделенные из вытесненной нефти обр. 1 и 5, исследованы методами ЭПР спектроскопии, элементного анализа и масс-спектрометрии MALDI. Показано, что исследованные асфальтены практически не отличаются по содержанию стабильных свободных радикалов и ванадилпорфириновых комплексов, соотношению углерода и водорода и по молекулярной массе.

Таким образом, доказана возможность появления в пласте концентрационного градиента асфальтенов при подтоке легких н-алканов. Различий в структуре асфальтенов, выделенных из нефти, отобранной сверху и снизу модельной установки, не установлено. Показано, что в процессе гравитационного разделения нефти совместного осаждения смол и асфальтенов не происходит.

1. Юсупова Т.Н., Ганеева Ю.М., Романов Г.В., Барская Е.Е. Физико-химические процессы в продуктивных нефтяных пластах. – М.: Наука, 2015. – 412 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/463

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПОНЕНТОВ НЕФТИ ИЗ КАРБОНАТНЫХ КОЛЛЕКТОРОВ НА ЕЕ ТЕМПЕРАТУРНО-РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Тимиргалиева А.Х., Барская Е.Е., Охотникова Е.Е., Ганеева Ю.М., Юсупова Т.Н.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ
Казанский научный центр РАН, Казань, Республика Татарстан, Россия
timirgalieva94@mail.ru.*

Известно, что для легких традиционных нефтей вязкость обусловлена содержанием высокомолекулярных соединений нефти (смола, асфальтенов и парафинов). Однако для нефтей из карбонатных коллекторов эта зависимость не всегда выполняется, поскольку добыча этих нефтей осложнена как поверхностными свойствами минералов коллекторов, так и особенностями состава нефти. Поэтому изучение взаимосвязи «состав высокомолекулярных компонентов – реологические свойства» нефтей из карбонатных коллекторов является актуальным.

Были исследованы особенности состава и реологического поведения нефтей из карбонатных пластов (обр.1) по сравнению с нефтями добываемыми из терригенных пластов (обр.2). В качестве объектов исследования была выбрана пара средневязких нефтей с близкими значениями кинематической вязкости. Был определен компонентный состав нефтей, содержание в них компонентов практически одинаковое. Наблюдаются лишь небольшие отличия в содержании твердых парафинов (табл. 1).

Таблица 1 – Компонентный состав и физико-химические свойства нефтей.

Месторождение	НК-200оС	масла	тв. пар.	БС	СБС	Асф.	ρ_{20} , г/см ³	μ_{20} , мм ² /с
Елховское (обр.1)	18,8	54,7	3,8	16,7	6,3	3,5	0,8994	53,99
Ромашкинское (обр.2)	16,3	56,2	8,3	17,4	6,3	3,8	0,8989	49,5

Изучение реологического поведения нефтей показало, что нефтей обр. 1 при низких температурах структурная вязкость значительно выше (рис. 1). Энергия активации также выше для нефтей обр. 1, что говорит о том, что карбонатные нефти более структурированные. Это отличие нивелируется с увеличением скорости сдвига.

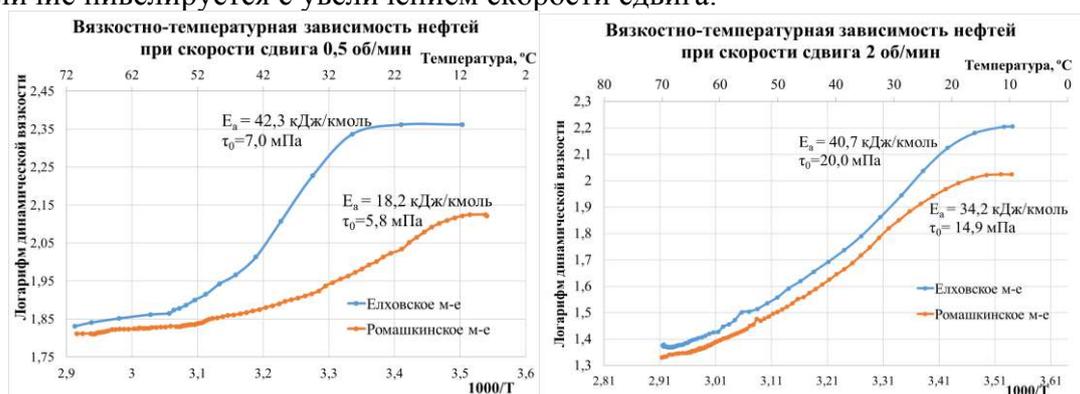


Рисунок 1 – Вязкостно-температурная зависимость нефтей при скоростях сдвига 0.5 и 2 об/мин.

Были обнаружены различия в составе высокомолекулярных компонентов нефти. По данным ИК-спектроскопии асфальтены обр. 1 характеризуются меньшими значениями алифатичности (А), окисленности (О) и разветвленности (R). Парафины обр 1 характеризуются большим содержанием высокомолекулярных углеводородов нормального строения.

Таким образом показано, что реологические характеристики нефтей одинакового строения в большей степени зависят от особенностей состава их высокомолекулярных компонентов.

DOI: 10.17223/9785946218412/464

**ГАЗОВЫЕ ГИДРАТЫ В НЕФТЯНЫХ ДИСПЕРСИЯХ: ОБЗОР ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИИ КЛАТРАТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИХ СО РАН**¹Манаков А.Ю., ¹Стопорев А.С., ¹Адамова Т.П., ¹Скиба С.С., ¹Сагиддулин А.К.,¹Сизиков А.А., ¹Струков Д.А., ²Стрелец Л.А., ²Сваровская Л.И., ²Алтунина Л.К.¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия*²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки*Институт химии нефти СО РАН, Томск, Россия**manakov@niic.nsc.ru, canc@ipc.tsc.ru*

В докладе будет сделан обзор результатов исследований процессов образования и разложения газовых гидратов в нефтяных дисперсиях, выполненных сотрудниками лаборатории в 2018-2019 гг. В частности, будут обсуждаться исследования температурной зависимости скорости нуклеации газовых гидратов в эмульсиях воды в нефтях. Как оказалось, при увеличении температуры всего на 2 градуса (с -5 до -3°C, давление около 12 МПа) время, необходимое для гарантированного образования гидрата метана в образце возрастает в 4-5 раз. Анализ полученных результатов позволяет предсказать, что при температурах 7-10°C вероятность образования гидрата в таких эмульсиях будет практически нулевой, хотя с точки зрения термодинамики гидрат в этих условиях стабилен. Сравнение полученных данных с литературными показывает, что скорость нуклеации в эмульсиях как правило значительно ниже, нежели для двухслойных систем вода - нефть. Это может быть связано с наличием на границе фаз структурно-механического барьера из адсорбированных компонентов нефти, необходимого для стабилизации эмульсии. Будут представлены результаты исследований процессов образования/разложения гидратов в эмульсиях воды в двух типах нефтей в условиях, моделирующих «остановленный поток», т.е. при временном прекращении добычи, когда в скважинах и трубопроводах находится статичная дисперсия нефти, воды(рассола) и попутного газа. Наиболее интересны результаты, полученные для процессов разложения гидратов при температурах ниже 0°C. Показано, что самоконсервация малых (менее 30 мкм) частиц гидрата метана в нефтяных дисперсиях может происходить при температурах -5 – -20°C без предварительного глубокого замораживания образца. Отметим, что самоконсервация гидратов состоит в резком (на много порядков) уменьшении скорости разложения гидратов в условиях, когда поверхность гидратных частичек покрывается коркой льда. Явление самоконсервации предложено использовать для целей транспортировки природного газа в форме гидратов. Для нефтяных дисперсий малых частиц гидрата самоконсервация впервые обнаружена авторами данной работы. Кроме того, будут обсуждаться результаты экспериментов по получению и разложению гидрата метана в эмульсиях воды в нефти при интенсивном перемешивании, что моделирует движущийся в трубе многофазный поток нефть - вода(рассол) - газ. При изучении скоростей разложения гидрата обнаружено, что при температурах ниже 0°C самоконсервация гидратных частиц в перемешиваемых образцах менее выражена, а скорости разложения при этом ненамного ниже, чем при положительных температурах. Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 17-17-01085.

DOI: 10.17223/9785946218412/465

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ И НЕФТЯНЫХ СМОЛ НА КРИСТАЛЛИЗАЦИЮ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

Морозова А.В., Волкова Г.И.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
anastassiya_petukhova@mail.ru*

В мировой практике добычи нефти проблема борьбы с отложениями парафина возникла более ста лет назад. Однако только в последние десятилетия в связи с выработкой крупнейших высокопродуктивных месторождений легкой нефти и вводом в эксплуатацию месторождений нефти с высоким содержанием высокомолекулярных углеводородов нормального строения, смол и асфальтенов, проблема борьбы с отложениями парафина в промышленном оборудовании приобрела особо острый характер.

В настоящее время исследуется возможность применения ультразвуковой обработки (УЗО) для нужд нефтяной отрасли [1]. Немаловажное отличие ультразвуковых обработок от многих других является их абсолютная экологическая безопасность как для недр, так и для окружающей среды.

Проведено исследование влияния комплексного воздействия ультразвуковой обработки и добавки бензолных (БС) и спирто-бензолных (СБС) нефтяных смол на свойства 6 % мас. раствора нефтяного парафина в декане.

Таблица 1 – Влияние условий обработки на температуры фазовых переходов раствора НП-д

Образец	Температура, °С		
	начала кристаллизации	максимальной скорости кристаллизации	золь-гель перехода
НП-д	17,6	16,0	2,4
+УЗО	18,3	17,4	3,0
+УЗО+СБС	19,4	18,7	-8,3
+УЗО+БС	20,7	19,8	-6,7

Температура начала кристаллизации увеличивается с 17,6 для исходного раствора до 18,3 после УЗО, 19,4 и 20,7 °С после УЗО и последующего введения СБС и БС соответственно. Такая же зависимость наблюдается для температуры максимальной скорости кристаллизации. В то время как температура золь-гель перехода в обработанных комплексным методом растворах на 9-11 °С ниже, чем в исходном растворе (табл. 1).

Температура застывания исходного раствора НП-д составляет 10 °С. Комплексная обработка раствора способствует снижению температур застывания.

По площади петель гистерезиса рассчитаны значения удельной энергии разрушения структурированных систем (ΔW) под действием механического сдвига. Значения ΔW для растворов НП-д, НП-д + УЗО равны 54 и 99 кДж/м³ соответственно. В присутствии СБС и БС в обработанном ультразвуком растворе разрушается кристаллическая структура исходного образца, о чем свидетельствует слияние кривых течения прямого и обратного хода, а значения ΔW стремятся к нулю.

Таким образом, процесс кристаллизации складывается из двух стадий: образование центров кристаллизации (или зародышей) и их рост. Комплексная обработка, согласно полученным результатам, сдвигает первую стадию кристаллизации в область более высоких температур, но при этом стабилизирует первичные кристаллические образования, замедляя, тем самым, процесс осадкообразования.

1. Anufriev R.V., Volkova G.I. Structural and mechanical properties of highly paraffinic crude oil processed in high-frequency acoustic field // Key Engineering Materials. – 2016. – V. 670. – P. 55 – 61.

DOI: 10.17223/9785946218412/466

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УСЛОВИЙ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА РАЗРУШЕНИЕ УСТОЙЧИВЫХ ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЙ

Волкова Г.И., Юдина Н.В.

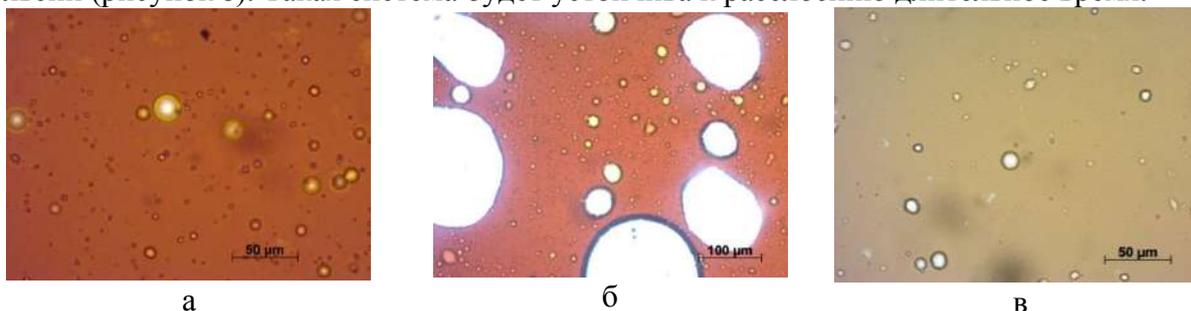
² Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
galivvol@yandex.ru

В большинстве случаев добыча нефти сопровождается извлечением на поверхность эмульсий, содержание пластовой воды в которых колеблется в очень широком диапазоне. Технологии разрушения эмульсий разнообразны и постоянно совершенствуются. В данной работе исследовано влияние условий акустического воздействия при частоте 22 кГц на разрушение устойчивой водонефтяной эмульсии.

Нативная эмульсия нефти Баклановского месторождения содержит 19 % мас. пластовой воды и не расслаивается в течение длительного времени. Ультразвуковую обработку (УЗО) эмульсии проводили в течение 10 и 15 мин при температуре бани 0 и 20 °С, интенсивности поля 2 и 18 Вт/см². Согласно полученным результатам уже после 10 мин обработки, независимо от интенсивности ультразвукового поля, эмульсия расслаивается сразу после прекращения перемешивания, а остаточное содержание воды в нефтяном слое составляет 6-7 % мас. Через сутки содержание воды в этих образцах снижается на 1 % мас. Эмульсия, обрабатываемая в течение 15 мин при $I=18$ Вт/см², расслаивается в процессе воздействия. Остаточное содержание воды в нефти составляет 4 % мас. и через сутки, также как после 10 мин обработки, понижается на 1 % мас. Обработка эмульсии в течение 15 мин полем меньшей интенсивности ($I=2$ Вт/см²) при температуре бани 20 °С позволяет снизить содержание воды сразу до 3 % мас. и это значение сохраняется через 24 ч.

УЗО нефти ($I=18$ Вт/см²) при температуре бани 0 °С менее эффективна: содержание остаточной воды равно 7-8 % мас.

На рисунке приведены микрофотографии эмульсии нефти до и после УЗО. Видно, что исходная эмульсия представлена, в основном, частицами воды до 10 мкм (рисунок а). УЗО в течение 15 приводит к агрегированию частиц дисперсной фазы с образованием частиц до 200 мкм, что сопровождается выделением водной фазы (рисунок б). Через 24 ч в органической фазе присутствуют капли воды, размеры которых не превышают 10 мкм, как и в исходной эмульсии (рисунок в). Такая система будет устойчива к расслоению длительное время.



а – исходная, б – после 15 мин УЗО при интенсивности 18 Вт/см², в - после 15 мин УЗО при интенсивности 2 Вт/см² через 24 ч

Рисунок – Микрофотографии эмульсии нефти Баклановского месторождения

Снижение содержания воды в нативной эмульсии нефти Баклановского месторождения после УЗО обусловлено превалированием процесса агрегирования частиц воды над процессом диспергирования. При прочих равных условиях расслоение эмульсий протекает эффективнее при более высоких температурах.

Низкочастотный ультразвук может быть перспективной технологией для транспорта и переработки сырой нефти. По-видимому, турбулентность в эмульсии, вызванная кавитацией, в поле интенсивностью 2-18 Вт/см² достаточна, чтобы нарушить плёнку на границе раздела фаз, стабилизирующую эмульсию, и вызвать коалесценцию капель воды.

DOI: 10.17223/9785946218412/467

АЗОТСОДЕРЖАЩИЕ ОСНОВАНИЯ АСФАЛЬТЕНОВ НЕФТИ УСИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Герасимова Н.Н., Сагаченко Т.А., Мин Р.С.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
canc@ipc.tsc.ru*

Информация о химической природе нефтяных асфальтенов, их термической стабильности, реакционной способности и функциональном состоянии гетероатомов (S, N, O) имеет большое значение для разработки и совершенствования технологий добычи и переработки тяжелого углеводородного сырья. Особый интерес представляют данные об особенностях состава и структуры азотсодержащих оснований (АО) асфальтеновых компонентов, которые являются природными ПАВ и каталитическими ядами.

Основной азот содержится, главным образом, в полициклическом ароматическом ядре молекул асфальтеновых веществ, экранированном нефтяными и алкильными фрагментами. В связи с этим для изучения АО асфальтенов битуминозной высокосернистой нефти Усинского месторождения был использован метод термической деструкции, позволяющий получить более низкомолекулярные и простые по составу соединения основного азота. Термолиз асфальтенов осуществляли при 450 °С в реакторе с полупроточным режимом и добавлением гексана для удаления из зоны реакции образующихся соединений.

Исследуемая нефть содержит 7,6 % асфальтенов с молекулярной массой (ММ) 1405 а.е.м. и содержанием основного азота ($N_{\text{осн.}}$) 0,41 % мас. В процессе термического разложения они генерируют 52,4 % растворимых в гексане продуктов (термолизатов) с ММ=478 а.е.м. и содержанием $N_{\text{осн.}}$ =0,23 % мас. Термолизаты деасфальтенизировали гексаном, из мальтенов, с использованием методов осаждения и экстракции, выделяли высокомолекулярные (893 а.е.м, выход 9,7 % мас.) и низкомолекулярные (390 а.е.м., выход 1,1 % мас.) АО [1].

Сравнительный анализ показал, что высокомолекулярные АО, составляющие большую часть выделенных соединений, заметно отличаются по структурно-групповым характеристикам от исходных асфальтенов. Их средние молекулы преимущественно состоят из меньшего числа структурных блоков ($m_a=2,1$ против 2,9), которые беднее насыщенными циклическими структурами ($K_n^*=2,3$ против 5,5). Отличительной чертой структурных блоков АО является более высокое число атомов углерода в парафиновых фрагментах ($C_n^*=6,5$ против 1,7). Количество метильных групп, не соединенных с ароматическим ядром и гетерофункциями, близко к 2 ($C_\gamma^*=1,6$), что составляет сравнительно малую долю от C_n^* . Это указывает на наличие в структурном блоке АО линейных или слабо разветвленных алифатических цепей. Структурные блоки асфальтенов не содержат алкильных фрагментов длиннее метильных. ($C_n^*=C_\gamma^*=1,7$). По средним размерам ароматических ядер структурные блоки молекул АО и асфальтенов различаются незначительно ($K_a^*=2,8$ против 3,2). Высокие значения параметра ($C_\alpha^*=5,0$ и 4,2), отражающего количество насыщенных атомов углерода, находящихся в α -положении к ароматическим циклам, указывают на центральное положение ароматических ядер в нафтеноароматической системе структурных блоков как молекул исходных асфальтенов так и молекул АО. Сохранность внутреннего расположения ароматических ядер при термическом воздействии, вероятнее всего связана с высокой степенью экранизации атома азота в гетероциклах молекул асфальтенов, следствием чего является достаточно высокая устойчивость соединений.

1. Чешкова Т.В., Герасимова Н.Н., Сагаченко Т.А., Мин Р.С. Химический состав нефти Крапивинского месторождения (сообщение 4) // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. – 2017. – Т. 328. – № 8. – С. 6–15.

DOI: 10.17223/9785946218412/468

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ГЕЛЕОБРАЗУЮЩИЕ КОМПОЗИЦИИ ДЛЯ ОГРАНИЧЕНИЯ ВОДОПРИТОКА

^{1,2}Козлов В.В., ^{1,2}Алтунина Л.К., ¹Стасьева Л.А., ¹Рождественский Е.А., ¹Кувшинов В.А.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Томск, Россия
alk@ipc.tsc.ru, kozlov_vv2004@mail.ru

В Институте химии нефти СО РАН на основании комплекса лабораторных исследований для ограничения водопритока (ОВП) и увеличения нефтеотдачи пермо-карбоновой залежи Усинского месторождения при паротепловом и пароциклическом воздействии, ранее были созданы гелеобразующие наноструктурированные композиции МЕГА и МЕГА-ПРО [1], для которых фактором, вызывающим гелеобразование, является тепловая энергия пласта или закачиваемого теплоносителя, без сшивающего агента. В основе композиций лежат две гелеобразующие системы: полимерная и неорганическая.

В развитие этих работ созданы низкотемпературные (20 – 70 °С) гелеобразующие композиции МЕГА-НТ и МЕГА-НТ-ПРО с двумя гелеобразующими компонентами – полимерным и неорганическим, образующие непосредственно в пласте наноструктурированные системы типа «гель-в-геле» с улучшенными реологическими характеристиками, для чего в состав композиций вводили терморегулятор гелеобразования.

В работе представлены результаты исследования влияния закачки композиций МЕГА-НТ и МЕГА-НТ-ПРО для ОВП на неоднородных моделях пласта, находящегося в естественном режиме эксплуатации, при закачке горячей воды и в условиях, моделирующих пароциклическое воздействие на пермо-карбоновую залежь Усинского месторождения, на нефтевытесняющую способность композиций и фильтрационные характеристики.

Исследование влияния закачки композиций на фильтрационные характеристики и коэффициент нефтевытеснения высоковязкой нефти пермо-карбоновой залежи Усинского месторождения на неоднородных моделях пласта в условиях, моделирующих прорыв воды при площадной закачке пара и пароциклической обработке (ПЦО), показало, что образование в модели пласта наноструктурированного геля приводит к существенному снижению подвижности жидкости, выравниванию/перераспределению фильтрационных потоков в модели пласта, при этом увеличивается коэффициент нефтевытеснения, особенно в более низко проницаемых моделях пласта. При закачке гелеобразующих композиций МЕГА-НТ и МЕГА-НТ-ПРО в нагнетательные, пароциклические или реагирующие добывающие скважины с забойной температурой от 20 до 70 °С непосредственно в пласте будет происходить образование наноструктурированного геля с повышенными вязко-упругими характеристиками. Это приведет к селективному ограничению водопритока, изменению направления фильтрационных потоков, снижению обводнённости, ограничению прорывов закачиваемого рабочего агента в добывающие скважины. Ожидаемый результат – интенсификация добычи нефти и прирост коэффициента извлечения нефти (КИН).

Созданные низкотемпературные композиции МЕГА-НТ и МЕГА-НТ-ПРО с улучшенными структурно-механическими свойствами перспективны для создания отклоняющих экранов в нефтяных пластах, перераспределения фильтрационных потоков, увеличения нефтеотдачи и ограничения водопритока.

1. Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Стасьева Л.А., Кувшинов И.В. Тенденции и перспективы развития физико-химических методов увеличения нефтеотдачи месторождений тяжелой нефти (обзор)//Химия в интересах устойчивого развития. – 2018.– Т.26.– № 3.– С. 261-277.

DOI: 10.17223/9785946218412/469

ВЛИЯНИЕ ПРИСАДКИ НА СВОЙСТВА МОДЕЛЬНЫХ ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЙ

Саврасова Е.А., Прозорова И.В., Юдина Н.В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
sanc@ipc.tsc.ru*

Длительная эксплуатация нефтяных месторождений и заводнение нефтеносных пластов приводят к образованию стойких водонефтяных эмульсий. Обводненность нефти вызывает интенсивное образование асфальтосмолопарафиновых отложений, повышает температуру застывания нефти, увеличивает вязкость, таким образом, создавая дополнительные проблемы при ее транспорте до пункта сбора и хранения продукции [1]. Использование полимерных присадок зачастую является решением проблемы осадкообразования [2], однако промышленные присадки ориентированы на перекачку товарной (обезвоженной) нефти. Поэтому особый интерес представляют исследования по влиянию полимерных присадок на структурно-механические характеристики водонефтяных эмульсий различного состава.

В качестве объектов исследования использовали искусственно приготовленные водонефтяные эмульсии. Дисперсионная среда эмульсий – высокопарафинистая модельная система, содержащая 7 % нефтяного парафина; дисперсная фаза – дистиллированная вода, содержание которой варьировалось от 10 до 40 %. В основе полимерной присадки представлен 50%-ный раствор полиалкилметакрилата C₁₅-C₁₉, модифицированного додециламином, в толуоле. Присадку вводили в концентрации 0,05 % (мас.).

Чтобы оценить прочность надмолекулярной структуры исходной модельной системы и водонефтяных эмульсий, были сняты кривые течения прямого и обратного хода при температуре 17 °С. По площадям петель гистерезиса рассчитаны величины внутренней энергии разрушения надмолекулярной структуры дисперсной системы ($E_{\text{внутр}}$), полученные значения представлены в таблице 1.

При появлении в составе нефтяной системы воды внутренняя энергия повышается, что свидетельствует об увеличении структурированности системы. Использование присадки приводит к снижению энергии модельной системы примерно в 16,5 раз, что связано с образованием ассоциатов между парафиновыми углеводородами и присадкой, прочность которых ниже, чем прочность ассоциатов в исходной системе.

С появлением воды в системе эффективность действия присадки растет по сравнению с исходной моделью. Энергии разрушения надмолекулярной структуры для 10 и 20% эмульсий в присутствии присадки снижаются 17-20 раз. Дальнейший рост доли водной фазы в эмульсии ведет к снижению эффективности действия присадки.

Таблица 1 – Влияние присадки на значение внутренней энергии модельной системы и водонефтяных эмульсий с различным содержанием воды

Содержание воды, % (мас.)	0	10	20	30	40
$E_{\text{внутр. исходная}}$, кДж/м ³	22,4	30,3	36,3	28,9	46,6
$E_{\text{внутр с присадкой}}$, кДж/м ³	2,4	1,3	1,8	5,7	16,5

1. Туманян Б.П. Научные и прикладные аспекты теории нефтяных дисперсных систем. – М.: Техника, 2000. – 336 с.
2. Агаев С. Г. О механизме действия ингибиторов парафиновых отложений // Материалы всероссийской научно-технической конференции «Нефть и газ Западной Сибири». – 2007. – Т.1. – С. 219-222.

DOI: 10.17223/9785946218412/470

ВЛИЯНИЕ ИНГИБИТОРА НА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ И РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОПАРАФИНИСТОЙ НЕФТИ

Шаронова А.Е., Шишмина Л.В.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Томск, Россия
shishmina@tpu.ru

Одним из последствий наличия в нефти твердых высокомолекулярных углеводородов, является образование парафиновых отложений, осложняющих добычу, сбор и подготовку таких нефтей. Это зачастую приводит к потерям в добыче, возрастанию энергетических затрат, капитальных и эксплуатационных расходов [1].

Наиболее перспективным методом борьбы с отложениями парафинов, является добавление в поток нефти ингибиторов парафиноотложений. Их принцип действия заключается в предотвращении выпадения парафина на оборудовании, стенках трубопроводов и НКТ.

Основными параметрами, по которым можно оценить эффективность влияния ингибитора – являются вязкость и температура застывания нефти.

Исследование заключается в оценке влияния ингибитора, при его добавлении к высокопарафинистой нефти Герасимовского месторождения Томской области. В качестве ингибитора парафиноотложений используется регулятор вязкости, представляющий собой раствор неионогенных поверхностно-активных веществ в органическом растворителе.

В таблице 1 представлены значения температур, полученные на измерителе «Кристалл» SX800 [2] без ингибитора и при его добавлении в концентрациях 400 г/т и 800 г/т. С увеличением концентрации наблюдается смещение температуры застывания нефти в область низких значений.

Таблица 1 – Значения температуры застывания нефти.

t застывания исходной пробы	t застывания при добавлении присадки C=400 г/т	t застывания при добавлении присадки C=800 г/т
+4°C	+2,9°C	минус 6,1°C

На рисунке 1 представлены характерные вязкостно-температурные зависимости, полученные на измерителе «Кристалл» SX850 [2]. Анализируя полученную зависимость, следует отметить, с увеличением концентрации добавляемой присадки вязкость снижается.

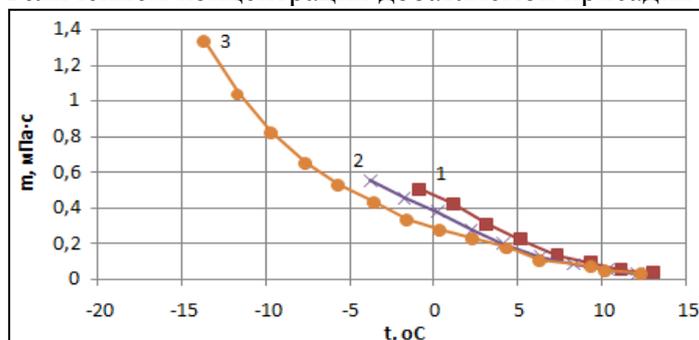


Рисунок 1 – Вид вязкостно-температурной зависимости
1 – исходная проба, 2 – при добавлении присадки C=400 г/т,
3 - при добавлении присадки C=800 г/т

1. Влияние ингибирующей присадки на процесс образования асфальтосмолопарафиновых отложений в высокопарафинистой нефти / И.В. Прозорова [и др.] // Химия в интересах устойчивого развития. – 2012. – №20. – С. 457-463.

2. Измеритель низкотемпературных показателей нефтепродуктов «Кристалл» руководство пользователя 11 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/471

НАНОДОБАВКИ ДЛЯ УВЕЛИЧЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПЛАСТОВ В ПРИЗБОЙНОЙ ЗОНЕ ПАРОНАГНЕТАТЕЛЬНЫХ СКВАЖИН

Руненков А. В.

*Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования
“Сколковский институт науки и технологий”, Москва, Территория ИЦ “Сколково”
anton.runenkov@skoltech.ru*

Увеличение мирового энергопотребления стимулирует развитие добычи высоковязкой нефти и битума, в том числе в России. Однако этот процесс является труднореализуемым, поскольку практически невозможен без искусственного нагрева пластов при помощи закачки теплоносителя (пара или горячей воды). С одной стороны, внедрение термических методов, способствует многократной интенсификации добычи высоковязкой нефти и битума особенно в терригенных пластах, с другой - сопряжено со значительными энергетическими затратами на производство теплоносителя, отрицательным воздействием на окружающую среду в результате выбросов CO₂ и дорогостоящей очисткой попутно добываемой воды. Для улучшения показателей эффективности на месторождениях высоковязкой нефти и битума все чаще применяют гибридные технологии в виде комбинаций различных видов термических методов или термических и химических методов увеличения нефтеотдачи пластов, а также закачки суспензий наночастиц Al₂O₃, TiO₂, NiO, CuO, Fe₂O₃ и других соединений [1, 2].

Данная работа также посвящена лабораторному обоснованию и компьютерному моделированию гибридной технологии на основе закачки пара через гравийные фильтры с наночастицами. Потенциального снижения паро-нефтяного отношения и увеличения нефтеотдачи пластов в процессе закачки в них теплоносителя через скважины, пробуренные с поверхности или из подземных горных выработок, можно добиться при помощи модификации теплопроводности пластов в призабойной зоне этих скважин за счет нанодобавок к установленным гравийным фильтрам. Известно, что значение теплопроводности терригенных и карбонатных пород при стандартных условиях изменяется в диапазоне от 2 до 4 Вт/(м*К), а значение теплопроводности некоторых наночастиц также при стандартных условиях достигает 20 - 40 Вт/(м*К), т.е. в 10 раз больше. В результате темп прогресса пластов может возрасти, а теплопотери закачиваемого теплоносителя во вмещающие породы - наоборот сократиться [3].

В работе представлены результаты экспериментальных и численных исследований о преимуществах изменения теплопроводности пластов в призабойной зоне паронагнетательных скважин за счет нанодобавок к гравийным фильтрам. На основе полученных данных установлено, что чем выше контрастность между значениями теплопроводности нано-добавок и базового материала, из которого изготовлен гравийный фильтр, тем выше результирующая теплопроводность при одинаковой концентрации нанодобавок в системе, модификация теплопроводности вблизи паронагнетательных скважин оказывает влияние не только на призабойную зону этих скважин, чем больше радиус гравийного фильтра с нанодобавками, тем быстрее устанавливается тепловое взаимодействие между нагнетательными и добывающими скважинами и выше добыча нефти, по крайней мере, на начальной стадии закачки теплоносителя.

1. Van Heel, A. P., van Dorp, J. J., & Boerrigter, P. M. (2008, January 1). Heavy-Oil Recovery by Steam Injection In Fractured Reservoirs. Society of Petroleum Engineers. doi:10.2118/113461-MS
2. Tarek, M. (2015, September 28). Investigating Nano-Fluid Mixture Effects to Enhance Oil Recovery. Society of Petroleum Engineers. doi:10.2118/178739-STU
3. Hamed Shokrlu, Y., & Babadagli, T. (2010, January 1). Effects of Nano-Sized Metals on Viscosity Reduction of Heavy Oil/Bitumen During Thermal Applications. Society of Petroleum Engineers. doi:10.2118/137540-MS

DOI: 10.17223/9785946218412/472

ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОЙ КОМПОЗИЦИИ ГБК И ПЛАСТОВОЙ МИКРОФЛОРЫ НА СОСТАВ И ЭФФЕКТИВНОСТЬ ВЫТЕСНЕНИЯ НЕФТИ УСИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Щербакова А.Г., Овсянникова В.С., Алтунина Л.К.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук (ИХН СО РАН), Томск, Россия
varja@ipc.tsc.ru

В Институте химии нефти СО РАН для увеличения проницаемости карбонатного коллектора была разработана кислотная композиция на основе аддукта неорганической кислоты, полиола и поверхностно-активного вещества (ГБК). Композиция совместима с минерализованными пластовыми водами, не образует нерастворимых осадков, оказывает обезвоживающее действие на нефть и может применяться как при низких температурах, так и в сочетании с тепловыми методами добычи.

В работе исследовано влияние композиции ГБК на рост, углеводородоксилирующую активность и вытеснение нефти Усинского месторождения пластовой микрофлорой при моделировании биодegradации и нефтевытеснения. Разбавленные растворы композиции ГБК стимулируют рост пластовой микрофлоры за счет карбамида и глицерина как источников азота, углерода и энергии. При биодegradации нефти динамика численности микрофлоры имела несколько пиков, соответствующих утилизации углеводов (УВ) с разной биодоступностью – насыщенных, ароматических, гибридных (рисунок, а), в присутствии композиции ГБК численность и ферментативная активность была выше контроля на протяжении всего опыта. В составе нефти возросли окисленность и ароматичность (рисунок, б), изменился групповой состав, а также распределение моно-, би- и триароматических УВ.

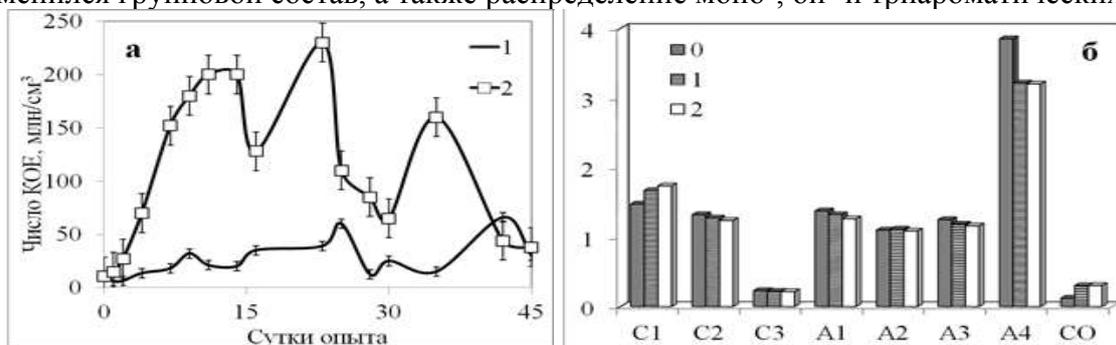


Рисунок – Численность микрофлоры (а) и изменение структурного состава (б) при биодegradации нефти Усинского месторождения в присутствии композиции ГБК

Таблица – Характеристики моделей и параметры вытеснения нефти композицией ГБК и пластовой микрофлорой (м/о)

Параметр	№ 1 10% ГБК	№ 2 10 % ГБК + м/о	№ 3 м/о	№ 4 10 % ГБК + м/о
Проницаемость, мкм ²	433.0	504.0	39.6	37.6
Поровый объем, см ³	40.5	40.4	37.8	38.0
Отн. прирост коэфф. нефтевытеснения, %	16.6	21.5	9.3	13.4

Физическое моделирование вытеснения нефти Усинского месторождения при высокой (модели №№ 1 и 2) и низкой (модели №№ 3 и 4) проницаемости показало более высокие приросты коэффициента вытеснения при совместном воздействии композиции и углеводородоксилирующей микрофлоры, что может косвенно свидетельствовать о вкладе микрофлоры в дополнительную добычу нефти в промышленных условиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, в рамках ФЦП, Соглашение №14.604.21.0176, от 26.09.2017 г., уникальный идентификатор – RFMEFI60417X0176 с использованием оборудования ЦКП ТНЦ СО РАН.

DOI: 10.17223/9785946218412/473

**ТЕРМОБАРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНОЙ
ХИМИЧЕСКОЙ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ПАВ**

Филатов Д.А., Рождественский Е.А., Алтунина Л.К.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук (ИХН СО РАН), Томск, Россия
canc@ipc.tsc.ru*

В Институте химии нефти СО РАН разработана многофункциональная химическая композиция на основе ПАВ, которая одновременно обладает как нефтewытесняющими, так и потокоотклоняющими свойствами.

Исследования по изучению физико-химических свойств разработанной многофункциональной нефтewытесняющей композиции проводили на установке периодического действия «Parr 5500», оснащенной автоматическим контроллером управления «Parr 4848», который позволяет проводить эксперименты в диапазонах температуры от 23 до 225 °С и давления от 0,1 до 20,3 МПа.

Эксперименты проводили при температуре 100 °С и трех значений давления (7,5; 9,5 и 12 МПа), трех значений концентрации диоксида углерода (20; 40 и 60 % мол.) и без добавления CO₂ в реактор и тех же давлениях.

Проанализировав значения межфазного натяжения исследованной композиции на границе с нефтью с добавлением CO₂, было установлено, что межфазное натяжение исходной композиции является низким и составляет 0,93 мПа·с, что свидетельствует об её высоких нефтewотмывающих свойствах. После термостатирования композиций с CO₂ с концентрациями 20; 40 и 60 % мол. при температуре 23-25 °С и давлении в реакторе от 75 до 120 атмосфер их межфазное натяжение остается низким и находится в интервале 0.14-3.22 мПа·с, при этом для большинства исследованных систем увеличение содержания углекислого газа приводит к уменьшению величины межфазного натяжения.

После теплового воздействия – термостатирования при 100 °С, рН растворов возрастает вследствие гидролиза карбамида, который с компонентами композиции образует щелочную боратно-аммиачную буферную систему. Вязкость композиции так же увеличивается вследствие взаимодействия солей алюминия с продуктами гидролиза карбамида CO₂ и NH₃, которые образуют золи гидроксида алюминия за счет реакции гидролитической поликонденсации ионов алюминия. При этом с увеличением концентрации CO₂ в реакторе вязкость композиции уменьшается, что обусловлено снижением скорости реакций гидролитической поликонденсации и гидролиза карбамида, а также смещением равновесия реакции гидролиза в сторону образования исходного вещества – карбамида.

Анализ физико-химических свойств многофункциональной композиции после термостатирования при 100 °С и трех значений давления (7,5; 9,5 и 12 МПа) без добавления CO₂ показали, что характер изменения физико-химических свойств композиции практически такой же, как и при термостатировании с CO₂. Межфазное натяжение композиций на границе с нефтью после термостатирования также остается низким и находится в интервале 0,62-3,99 мПа·с, что свидетельствует о сохранении высоких нефтewотмывающих свойств композиции. Значение водородного показателя – рН после термостатирования также увеличивается. При этом в щелочной области увеличение рН приводит к уменьшению величины межфазного натяжения. Повышение давления от 7,5 до 12 МПа приводит к уменьшению значения рН композиции, так как равновесие реакции гидролиза карбамида с образованием газообразных продуктов смещается в сторону обратной реакции, то есть в сторону образования карбамида. Вязкость растворов также увеличивается за счёт образования золь гидроксида алюминия.

На основании проведенных исследований можно заключить, что в целях увеличения нефтewотдачи возможна закачка в пласт многофункциональной химической нефтewытесняющей композиции как совместно с углекислым газом, так и без него.

DOI: 10.17223/9785946218412/474

**ВЛИЯНИЕ НЕФТЕВЫТЕСНЯЮЩЕЙ КОМПОЗИЦИИ НА ОСНОВЕ ПАВ
НА ОКИСЛЕНИЕ ВЫСОКОВЯЗКОЙ ВЫСОКОПАРАФИНИСТОЙ НЕФТИ**

Филатов Д.А., Овсянникова В.С.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук (ИХН СО РАН), Томск, Россия
canc@ipc.tsc.ru

Характерной особенностью мировой структуры сырьевых углеводородных ресурсов является увеличение доли трудноизвлекаемых запасов, к которым относятся высоковязкие высокопарафинистые нефти. В ИХН СО РАН разработаны нефтевытесняющие композиции на основе поверхностно-активных веществ (ПАВ), имеющие высокие моющие свойства и увеличивающие добычу нефти на 15-20 %, которые при многократном разбавлении могут служить питательным субстратом для увеличения роста пластовой микрофлоры.

Микроорганизмы нефтяного пласта способны существовать в широком диапазоне температур и давлений, вырабатывать продукты метаболизма с поверхностно-активными свойствами, снижающими межфазное натяжение на границе раздела фаз «нефть – вода – порода». Дополнительная добыча нефти, связанная с активностью углеводородоокисляющей пластовой микрофлоры, может достигать 5-7 % [1].

Цель исследования: изучить процесс окисления высоковязкой высокопарафинистой нефти аборигенной пластовой микрофлорой с применением нефтевытесняющей композиции, содержащей азотистые субстраты и ПАВ (нефтенол ВВД и NP-50).

Объектом исследования являлась высоковязкая высокопарафинистая нефть месторождения Дзуунбаян (вязкость 22900 мПа·с, содержание n-алканов 22 %). Биодegradацию нефти исследовали в лабораторных условиях при периодическом культивировании в жидкой минеральной среде Раймонда в течение 30 суток. Опыт проводили в колбах объемом 1000 мл, объем питательной среды составлял 300 мл, нефть вносили из расчета 3 % (по объему). Композиции вносили в концентрации 0,5 % (по объему). В каждую колбу вносили 5 мл пластовой воды, содержащую аборигенную микрофлору соответствующего месторождения. Контрольная колба без внесения композиции.

Пластовая микрофлора месторождения Дзуунбаян насчитывала $2-2,5 \cdot 10^4$ КОЕ/мл. Доминировали представители рода *Bacillus*. Численность пластовой микрофлоры в присутствии нефти (без внесения композиции) не превышал $1,5-2 \cdot 10^6$ КОЕ/мл. Нефтевытесняющие композиции на основе нефтенола ВВД и NP-50 стимулировали рост пластовой микрофлоры более чем на 3 порядка по сравнению с контролем. Данные ИК-спектроскопии показывают наличие кислородсодержащих соединений в биодegradированных нефтях, которые являются промежуточными продуктами окисления n-парафинов, обладают поверхностно-активными свойствами и способствуют эмульгированию нефти в воде, что увеличивает площадь поверхности ее контакта с микрофлорой, то есть увеличивается доступность к окислению.

Показано, что нефтевытесняющая композиция на основе ПАВ стимулирует рост численности микроорганизмов на 3-4 порядка, ферментативную активность – в 4-12 раз. Это сопровождается снижением алифатичности и увеличением окисленности нефти.

Результаты исследования могут быть использованы для создания комплексного физико-химического и микробиологического метода увеличения нефтеотдачи, который имеет перспективы на обводненных месторождениях, содержащих углеводородоокисляющую микрофлору.

1. Алтунина Л.К., Сваровская Л.И., Овсянникова В.С. Перспективы применения комплексного физико-химического и микробиологического метода повышения нефтеотдачи на месторождении Белый Тигр (Вьетнам) // Нефтехимия. – 2008. – Т. 48, № 6. – С.474-478.

DOI: 10.17223/9785946218412/475

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЙ НА ЭНЕРГИЮ АКТИВАЦИИ ВЯЗКОГО ТЕЧЕНИЯ

Небогина Н.А., Юдина Н.В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
nebogina@ipc.tsc.ru*

Состояние любой термодинамической системы зависит от соотношения энергии межмолекулярного взаимодействия и теплового движения, поэтому для нефтяной системы оказываются взаимосвязанными энергия вязкого течения и параметр ассоциативности (структурированности) жидкости.

Расчет значений энергии активации вязкого течения для нефти и 10 – 30 % водонефтяных эмульсий, сформированных при 10, 20, 40 и 60 °С, показал, что исследуемые системы характеризуются двумя значениями $E_{1акт}$ и $E_{2акт}$, что связано со скачкообразным изменением степени ассоциации молекул в НДС и свидетельствует о произошедших фазовых переходах (табл. 1). Введение воды в нефтяную систему и увеличение ее содержания при всех исследуемых температурах приводит к увеличению значений $E_{1акт}$ более чем в 10 раз. При этом максимальные значения $E_{1акт}$ и $E_{2акт}$ наблюдаются у нефтяных систем, сформированных при 40 °С, что свидетельствует о значительном увеличении степени ассоциативности исследуемых систем, образованных в этих условиях. Эмульсии, сформированные при 60 °С, характеризуются самыми низкими значениями $E_{2акт}$. Увеличение содержания воды в эмульсиях до 30 %, сформированных при 10, 20 и 40 °С приводит к росту значений $E_{1акт}$. Обратная тенденция наблюдается для $E_{2акт}$ – снижение энергия активации вязкого течения в среднем на 20 – 60 % наблюдается при увеличении водной фазы эмульсии.

Таблица 1 – Энергия активации вязкого течения нефти и водонефтяных эмульсий, сформированных при различных температурах

Образец	Температура формирования, °С							
	10		20		40		60	
	$E_{1акт}$	$E_{2акт}$	$E_{1акт}$	$E_{2акт}$	$E_{1акт}$	$E_{2акт}$	$E_{1акт}$	$E_{2акт}$
нефть	2,3	321,0	2,5	354,0	4,7	355,6	3,5	207,8
10 %	29,9	360,0	29,1	376,4	48,2	428,0	35,7	265,9
20 %	47,4	327,0	33,2	364,5	57,3	363,0	44,9	234,0
30 %	63,3	306,7	68,1	295,0	93,9	267,6	46,5	218,6

Реологические свойства для всех исследуемых 40 % эмульсий в исследуемом температурном диапазоне имеют три значения энергии активации вязкого течения ($E_{1акт}$, $E_{2акт}$ и $E_{3акт}$, табл. 2), то есть увеличение содержания воды до 40 % приводит к увеличению фазовых переходов.

Таблица 2 – Энергия активации вязкого течения 40 % водонефтяных эмульсий, сформированных при различных температурах

Температура формирования, °С											
10			20			40			60		
$E_{1акт}$	$E_{2акт}$	$E_{3акт}$	$E_{1акт}$	$E_{2акт}$	$E_{3акт}$	$E_{1акт}$	$E_{2акт}$	$E_{3акт}$	$E_{1акт}$	$E_{2акт}$	$E_{3акт}$
298,3	34,0	223,0	197,8	44,9	239,0	332,0	49,6	212,0	171,2	51,3	226,9

Для 40 % эмульсий, сформированных при 40 °С, наблюдается значительное увеличение $E_{1акт}$, что, вероятно, связано с образованием более крупных и прочных надмолекулярных структур, по сравнению с 40 % эмульсиями, сформированными при других температурах.

Таким образом, температура формирования определяет прочность связей в образующихся ассоциативных комплексах исследуемых водонефтяных эмульсий.

DOI: 10.17223/9785946218412/476

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЛЬТРАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК И НЕФТЕВЫТЕСНЯЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ КИСЛОТНОЙ КОМПОЗИЦИИ ДЛЯ УВЕЛИЧЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ^{1,2}Чернова У.В., ²Шолидодов М.Р., ^{1,2}Козлов В.В., ^{1,2}Алтунина Л.К.¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук (ИХН СО РАН), Томск, Россия²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Томск, Россия
alk@ipc.tsc.ru, kozlov_vv2004@mail.ru

Более 20 лет в Институте химии нефти СО РАН ведется разработка новых технологий увеличения нефтеотдачи, созданы различные физико-химические методы увеличения коэффициента извлечения нефти [1].

В настоящей работе представлены результаты лабораторных фильтрационных испытаний новой кислотной нефтевытесняющей композиции на основе координирующего растворителя, поверхностно-активного вещества и комплексного соединения, созданной для реализации новых технологических решений интенсификации разработки и увеличения нефтеотдачи месторождений высоковязкой нефти на естественном режиме и в сочетании с тепловыми методами для условий пермокарбонатной залежи Усинского месторождения. Механизм действия кислотной нефтевытесняющей композиции основан на ее химической эволюции непосредственно в пласте с приобретением коллоидно-химических свойств, оптимальных для целей нефтевытеснения. Под влиянием термобарических пластовых условий, а также в результате взаимодействия с породой коллектора и пластовыми флюидами композиция способна образовывать эффективные нефтевытесняющие жидкости для интенсификации добычи и увеличения нефтеотдачи месторождений высоковязкой нефти.

Эксперименты по физическому моделированию процесса нефтевытеснения с использованием композиции проводили на установке для изучения фильтрационных характеристик модели неоднородного пласта, состоящей из двух параллельных колонок, заполненных дезинтегрированным керновым материалом и имеющих различную проницаемость. Значения газопроницаемости приготовленных колонок составляли от 0,58 до 3,08 мкм². Отношение проницаемостей параллельных колонок лежало в интервале 1,2:1–4,0:1. Перед экспериментом колонки насыщали моделью пластовой воды для определения порового объема, которую затем вытесняли моделью нефти, в результате чего получали водо-нефтенасыщенную колонку с известной нефтенасыщенностью. Через модель неоднородного пласта фильтровали модель пластовой воды до полной обводненности продукции на выходе. Коэффициент нефтевытеснения из колонок при этом составил 2,7–50,0 % в зависимости от проницаемости колонок. После этого проводили закачку раствора кислотной нефтевытесняющей композиции и после термостатирования вновь фильтровали модель пластовой воды. Прирост коэффициента нефтевытеснения из колонок составил 2,3–31,0 %, в среднем по модели неоднородного пласта 15,9–19,5 %. Под действием пластовых условий компоненты нефтевытесняющей композиции образуют сильную кислоту, способную взаимодействовать с карбонатной породой, увеличивая ее приемистость, высокая отмывающая способность ПАВ, входящих в состав композиции, обусловлена оптимальными условиями за счет образования в пласте буферной системы большой емкости. Таким образом, установлено, что кислотная нефтевытесняющая композиция имеет высокую нефтевытесняющую способность и может быть рекомендована для промысловых испытаний.

1. Алтунина Л.К., Кувшинов В.А. Физико-химические методы увеличения нефтеотдачи пластов // Вестник Санкт-Петербургского университета. – 2013. – № 4 (2). С. 46–76.

DOI: 10.17223/9785946218412/477

**ПРИМЕНЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ МЕТОДОВ БОРЬБЫ С ОТЛОЖЕНИЯМИ
АСФАЛЬТОСМОЛОПАРАФИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ**

¹Валиев Д.З., ¹Кемалов Р.А., ¹Кемалов А.Ф.

¹*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия
public.mail@kpfu.ru*

На сегодняшний день одним из наиболее серьезных осложнений при добыче и транспортировке нефти являются отложения асфальтосмолопарафиновых веществ (АСП-В). Как показывает практика, предотвращение отложения тяжелых органических соединений является менее дорогостоящим методом, чем их постоянное удаление. При этом достигается наиболее устойчивая и безаварийная работа оборудования, снижаются затраты на перекачку углеводородного сырья, сокращаются простои оборудования [1].

Одним из перспективных методов является использование физических методов, а также совместное использование нескольких способов воздействия на нефтяные дисперсные системы, например, применение различных вариантов электрических, электромагнитных, магнитных, вибрационных или акустических полей [2].

Физические методы основаны на воздействии механических и ультразвуковых колебаний (вибрационные методы), а также электрических, магнитных и электромагнитных полей на добываемую и транспортируемую продукцию. Акустические способы борьбы с отложениями представлены вибрационными методами, используемыми на практике как для предотвращения, так и для удаления отложения АСП-В. Они позволяют создавать высоко- (ультразвуковые) и низкочастотные колебания в области парафинообразования, которые, воздействуя на кристаллы парафина, вызывают их микроперемещение, что препятствует осаждению парафина на стенках труб. Основные физико-химические эффекты, которые возникают в жидкости под действием акустических полей, обусловлены главным образом нелинейными эффектами, из которых наиболее важным является кавитация [3].

Ныне существуют предприятия, выпускающие различные ультразвуковые приборы, реакторы и депарафинизаторы. Например, автономное электрическое устройство (АЭУ) – виброакустическая установка производства НПП «ЭНЕРГОМАГ» – используется для предотвращения и ликвидации отложений на металле, ликвидации пробок, восстановления и интенсификации потока нефти. Рабочие частоты находятся в пределах 40–60 Гц. Предприятие «МПК ТЕХПРОМ ВМП» выпускает аппараты «ШТОРМ УКМ НП», которые являются высокоэффективным и высокотехнологичным, импортозамещающим промышленным оборудованием по очистке и защите нефтескважин, труб НКТ, насосов различной модификации, нефтепроводов, узлов перекачки/перегонки нефти и другого оборудования от АСПО, парафинов и прочих различных отложений. Принцип работы данного устройства, основан на радиочастотном импульсном методе воздействия.

Физические методы при умелом применении уже сегодня позволяют эффективно бороться с отложениями АСП-В при добыче и транспорта нефти. Для каждого конкретного случая может примениться тот ли иной способ воздействия.

1. Валиев Д.З., Кемалов А.Ф., Кемалов Р.А. Анализ современного состояния проблемы предотвращения образования и утилизации отложений асфальтосмолопарафиновых веществ в нефтяной отрасли // Экспозиция Нефть Газ. – 2019. - №2. С. 103-108.
2. Волкова Г.И. и др. Подготовка и транспорт проблемных нефтей (научно-практические аспекты). – Т: Изд. Дом ТГУ, 2015. – 136 с.
3. Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф., Валиев Д.З. Термодинамика активации вязкого течения и структурно-динамический анализ высоковязкой нефти при ультразвуковом воздействии // Нефтяное хозяйство. – 2012. – №12. – С. 2-5.

DOI: 10.17223/9785946218412/478

АНАЛИЗ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ИЗМЕНЕНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕФТЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ГЛУБИНЫ ЗАЛЕГАНИЯ

¹Ященко И.Г., ²Крупницкий В.В., ¹Полищук Ю.М.

¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*

²*Югорский научно-исследовательский институт информационных технологий, Ханты-Мансийск, Россия
sric@ipc.tsc.ru, office@uriit.ru*

Анализ информации из базы данных по физико-химическим свойствам нефтей показывает [1], что наибольшие запасы нефтяных ресурсов сосредоточены на глубинах до 2 км. Проведенный анализ распределения нефтей по физико-химическим свойствам на глубинах до 6 км показал, что в разных нефтяных бассейнах плотность и вязкость нефтей снижается с глубиной. Содержание серы, смол и асфальтенов с глубиной сокращается, а содержание парафинов – до глубины 3-4 км растет, а далее с ростом глубины уменьшается. Для объяснения причин и механизмов формирования указанных закономерностей обратимся к результатам геофизических исследований и геологического моделирования.

Результаты проведенных исследований [2] дают возможность следующим образом описать флюидодинамическую модель формирования залежей в кровле палеозойских отложений. В процессе эволюции нефтегазоносных резервуаров нефтепроизводящие отложения вступают в основную фазу нефтегазообразования, в результате чего формируются первичные залежи углеводородов в осадочном чехле. Последующие процессы эволюции тектонических движений приводят к изменению пластового давления в массивах пород. Происходящее изменение давления инициирует движение флюидов, в том числе и углеводородов, в декомпрессионные зоны [2]. Проведенное моделирование напряженного состояния пород показывает, что на границе осадочного чехла и фундамента на краях опускающихся блоков формируются зоны минимальных значений давления, называемых зонами декомпрессии.

Таким образом, в результате описанной эволюции тектонических движений возникают условия для формирования глубокозалегающих вторичных залежей, как правило, характеризующихся меньшими вязкостью и плотностью нефтей и меньшей концентрацией основных показателей химического состава (серы и асфальто-смолистых веществ). Следовательно, на глубинах ниже трех километров в породах, обладающих минимальной первичной пористостью и прошедших все стадии литогенеза, направленность флюидодинамических процессов в значительной степени определяется эволюцией их напряженно-деформированного состояния, что и может служить обоснованием указанных выше закономерностей изменения физико-химических свойств нефтей.

1. Ященко И.Г., Полищук Ю.М. Трудноизвлекаемые нефти: физико-химические свойства и закономерности размещения. – Томск: Изд-во «В-Спектр», 2014. – 154 с.
2. Глухманчук Е.Д., Тетенов Е.В., Крупницкий В. В. Формирование декомпрессионных зон в осадочном чехле как фактор, инициирующий нисходящую миграцию углеводородов в условиях Западной Сибири // Пути реализации нефтегазового потенциала ХМАО / Матер. 10-й научно-практ. конф. – Ханты-Мансийск: Изд. дом «ИздатНаукаСервис». 2007. – С. 254-257.

DOI: 10.17223/9785946218412/479

СОНОХИМИЧЕСКИЙ МОДУЛЬ ПЕРЕКАЧКИ ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ¹Муллагаев М.С., ²Муллагаев Р.М., ³Волкова Г.И.¹ФГБУН Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия²Российский государственный университет нефти и газа имени И.М. Губкина, Москва, Россия³ФГБУН Институт химии нефти СО РАН, Томск, Россия

mullakaev@mail.ru, r.m.mullakaev@mail.ru

Работа посвящена разработке оборудования и сонохимической технологии подготовки к транспортировке высокопарафинистых и смолистых нефтей. Для этой цели использовали акустическое воздействие колебаниями низкой и высокой частоты, приводящее к разрушению надмолекулярной структуры нефтяной дисперсной системы (НДС).

На первом этапе в лабораторном масштабе были изучены реологические свойства, кинетика релаксационных процессов в НДС после акустического воздействия, кинетическая и агрегативная устойчивость НДС, измерены температура застывания, температуры начальной и спонтанной кристаллизации, скорость осадкообразования, и рассчитаны энергетические параметры вязкого течения. В результате проведенных исследований выявлены рациональные условия обработки нефтей различного группового состава, приводящей к снижению вязкости,

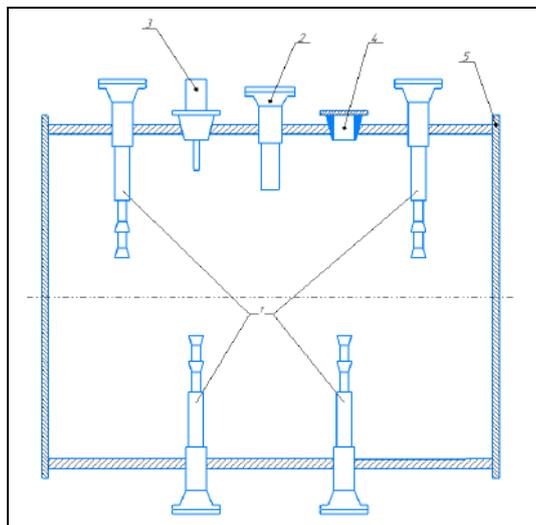


Рисунок - Сонохимический модуль перекачки высоковязкой нефти;

- 1 - электроакустические преобразователи;
- 2 - гидродинамический излучатель;
- 3 – насос для слива воды;
- 4 – люк для химических реагентов;
- 5 – фланец трубопровода.

температуры застывания и скорости образования АСПО, подобраны химические реагенты, улучшающие вязкостно-температурные характеристики нефтей, проведена комплексная обработка исследуемых нефтей, включающая высокочастотную акустическую и химическую обработку, показан синергизм комплексного воздействия [1-3].

Для осуществления сонохимического воздействия на НДС сконструирован ряд высокоэффективных проточных промышленных реакторов. На рисунке приведена одна из схем компоновки сонохимического модуля.

Проведены полевые испытания созданных прототипов проточных реакторов, определены режимные и технологические параметры обработки, выбор оптимальной конструкции оборудования, а также уточнение составов присадок. Учитывая способность обработанной нефти сохранять низкую эффективную вязкость в течение не менее 30 ч, можно утверждать, что использование предлагаемой технологии позволяет сократить количество тепловых станций, а также снизить мощность промежуточных насосных станций.

1. Муллагаев М.С. Ультразвуковая интенсификация добычи и переработки нефти. - М.: ОАО "ВНИИОЭНГ", 2014. - 168 с.

2. Mullakaev M.S. Ultrasonic intensification of the processes of enhanced oil recovery, processing of crude oil and oil sludge, purification of oil-contaminated water. - М.: HELRI, 2018. - 376 p.

3. Mullakaev M.S., Volkova G.I., Gradov O.M. Effect of ultrasound on the viscosity-temperature properties of crude oils of various compositions // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. - 2015. - Vol. 49. - No. 3. P. 287 – 296.

DOI: 10.17223/9785946218412/480

ОСОБЕННОСТИ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ НЕФТЯНЫХ СИСТЕМ

Стрелец Л.А.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
sanc@ipc.tsc.ru*

Вязкость нефтей и нефтепродуктов – довольно сложное явление, хотя этот параметр стандартно используется для характеристики этих веществ. Нефть это многокомпонентная нестабильная система, содержащая сотни химических веществ, которые в зависимости от соотношения концентраций друг к другу и внешних условий (температура, давление) могут существовать как отдельные соединения, так и в виде сложных комплексов. Это в свою очередь сильно влияет на физико-химические свойства нефти, особенно на вязкость.

Классически вязкость определяется как внутреннее трение, свойство текучих и твердых материалов. Различают кинетическую вязкость, динамическую, объемную, условную, эффективную, относительную и пр., каждая из которых характеризует определенное состояние вещества, и соответственно существуют разные определения, разные физические модели, описываемые отдельными уравнениями.

На практике для одной и той же нефти часто бывает несовпадение значений вязкости, взятых из разных источников; на результаты измерений сильно влияет методика и режим измерений, тип прибора (капиллярный, ротационный, вибрационный), тепловая предыстория образца. Последняя (особенно для парафинистых нефтей) дает разные значения вязкости даже при использовании одинаковых приборов и схем измерений.

Проведены параллельные реологические измерения сырых нефтей (U – высокосмолистая нефть, L - высокопарафинистая) в осцилляционном (Osc) и ротационном (Rot) режиме измерений на реометре НААКЕ RheoStress 600. Полученные результаты (см. таблицу 1) ярко демонстрируют разницу определяемой вязкости в зависимости от режима измерения и типа исследуемой нефти.

Таблица 1. Вязкость двух типов сырых нефтей, найденная при разных режимах измерения.

T, °C	Вязкость, [Па·с] Osc		Вязкость, [Па·с] Rot			
	U	L	U		L (PZ)	
			3.0 c ⁻¹	300.0 c ⁻¹	3.0 c ⁻¹	300.0 c ⁻¹
10	144.06	6621.8	159.95	0.128	–	–
15	78.42	2168.3	93.105	0.039	–	–
20	33.42	330.47	57.99	0.063	2.458	0.079
30	13.46	16.210	18.58	0.854	1.949	0.059
40	6.043	0.0215	7.441	2.855	1.384	0.041
50	2.794	0.0151	2.966	2.379	1.214	0.024
60	1.295	0.0050	1.340	1.187	1.076	0.0
70	0.731	–	0.681	0.616	–	–

В ходе работы обнаружены особенности реологического поведения высокосмолистого образца при низких температурах. При интерпретации реологических измерений нефтей необходимо учитывать метод определения вязкости и тип нефти. Сравнение величин вязкости нефтей без учета условий их определения является некорректным.

DOI: 10.17223/9785946218412/481

**ВНУТРИПЛАСТОВОЕ ОБЛАГОРАЖИВАНИЕ ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕФТЕРАСТВОРИМОГО КАТАЛИЗАТОРА НА ОСНОВЕ
НИКЕЛЯ**

Алиев Ф.А., Вахин А.В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
public.mail@kpfu.ru*

В мировой структуре углеводородных ресурсов постоянно увеличивается доля высоковязких нефтей. Освоению таких залежей таких неконвенциональных ресурсов уделяется все большее внимание [1-2]. Использование катализаторов вместе с закачкой пара позволяет увеличить степень нефтеизвлечения [3-4]. Катализаторы стимулируют протекание реакций гидрирования, гидрогенолиза, гидролиза, крекинга, приводящих к улучшению физико-химических и реологических характеристик нефти. Показано, что при использовании катализаторов увеличивается содержание насыщенных и ароматических углеводородов, уменьшается содержание смолисто-асфальтовых компонентов и твердых n-алканов. Разрушение смол и асфальтенов приводит к снижению фильтрационных затруднений при нефтеизвлечении. В числе перспективных направлений исследований – катализаторы, которые закачиваются в пласт в виде раствора форме. Активная форма образуется в пласте *in situ* при определенной температуре [5].

В работе исследован процесс аквагермолиза высоковязкой нефти, разрабатываемого технологией CSS. С целью интенсификации процессов внутривластового преобразования использованы катализаторы на основе никеля. Активная форма катализатора формируется после паротеплового воздействия на нефть. В работе представлены результаты определения группового состава, газовой хроматографии и ИК-спектроскопии насыщенной фракции исходной и преобразованных образцов нефти и МАЛДИ-спектрометрии асфальтенов. Установлено, что в присутствии катализатора обеспечивается более глубокая степень снижения асфальто-смолистых соединений. Термокаталитическое воздействие обеспечивает необратимое снижение вязкости добываемой нефти и может повысить степень извлечения нефти.

1. Maity, S. K.; Ancheyta, J.; Marroquín, G. Catalytic Aquathermolysis Used for Viscosity Reduction of Heavy Crude Oils: A Review. *Energy Fuels* 2010, 24, 2809-2816
2. Varfolomeev, M.A., Nagrimanov, R.N., Samatov, A.A., Rakipov, I.T., Nikanshin, A.D., Vakhin, A.V., Nurgaliev, D.K., Kok, M.V. Chemical evaluation and kinetics of Siberian, north regions of Russia and Republic of Tatarstan crude oils//*Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects*. - 2016. - V.38(8). - P. 1031-1038.
3. Jiang S., Liu X., Zhong L. In Situ Upgrading Heavy Oil by Aquathermolytic Treatment under Steam Injection Conditions//*SPE International Symposium on Oilfield Chemistry*, 2–4 February 2005, Houston. — SPE 91973.4
4. Wu C., Su J., Zhang R., Lei G., Cao Y. The Use of a Nano-nickel Catalyst for Upgrading Extra-heavy Oil by an Aquathermolysis Treatment under Steam Injection Conditions//*Petroleum Science and Technology*. –2013. –V. 31. –P. 2211–2218.
5. Vakhin A.V., Morozov V.P., Sitnov S.A., Eskin A.A., Petrovnina M.S., Nurgaliev D.K., Kayukova G.P., Romanov G.V., Yusupova T.N. Application of Thermal Investigation Methods in Developing Heavy-Oil Production Technologies//*Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. – 50(6). – 2015. – P. 569–578.

DOI: 10.17223/9785946218412/482

**МАТЕРИАЛЬНЫЙ БАЛАНС ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА ДОМАНИКОВЫХ
ОТЛОЖЕНИЙ ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ**

Онищенко Я.В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Институт геологии и нефтегазовых технологий, Казань, Россия
yaroslav.onishchenko.1991@mail.ru*

Горючие сланцы, характеризующиеся относительно высоким содержанием высокомолекулярных углеводородных соединений, следует рассматривать как нефтехимическое сырье для получения широкого спектра продуктов [1]. Однако высокая зольность, низкая реакционная способность керогена горючих сланцев требует применения новых высокоэффективных методов добычи. В числе наиболее перспективных методов необходимо указать внутрипластовое горение. Применение данной технологии определяется некоторыми особенностями, связанными со свойствами керогена и малой плотностью нефти в рассматриваемых породах–коллекторах.

Техногенное гидротермальное воздействие позволяет ускорить созревание нерастворимого органического вещества доманиковых отложений, степень зрелости которого не достигла нефтяного окна [2, 3].

В работе проведены эксперименты по искусственному созреванию органического вещества доманиковых отложений для определения количества генерируемых газообразных и жидких углеводородов. Определен материальный баланс по органическому веществу для исходного образца породы и термообработанной при 300 и 500°C.

Лабораторное моделирование гидротермального воздействия на образец породы Волго-Уральской НГП проводилось в реакторе-автоклаве при давлении 90 атм, температурах 300 и 500°C, продолжительности 24 ч.

Общее содержание газовых продуктов в интервале температур 300-500°C увеличивается за счет образования CO₂, который имеет различное происхождение: продукт окисления углеводородов и разложения карбонатов.

По данным группового анализа битумоида (SARA-анализ) основная часть растворимого органического вещества доманиковых пород относится к смолам и асфальтенам.

На основании данных элементного анализа кероген, выделенный из образца исходной породы, относится к II типу. С увеличением температуры экспериментов атомное соотношение Н/С снижается с 1,17 до 0,27, а отношение О/С с 0,06 до 0,04, что отражает процесс искусственного созревания керогена.

Проведено физическое моделирование техногенного созревания керогена. Исследован процесс внутрипластовой деструкции керогена под влиянием гидротермальных факторов.

Полученные в работе данные могут быть использованы для обоснования выбора перспективных участков доманиковых отложений для применения тепловых методов нефтеизвлечения.

1. Тиссо Б., Вельте Д. Образование и распространение нефти. М: Мир, 1981, 504 с.
2. Behar, F., Roy, S., Jarvie, D. 2010. Artificial maturation of a Type I kerogen in closed system: Mass balance and kinetic modelling. *Organic Geochemistry* 41(11):1235-47. DOI: 10.1016/j.orggeochem.2010.08.005.
3. Kayukova, G.P., Mikhailova, A.M., Feoktistov, D. A., Morozov, V.P., Vakhin, A.V. 2017. Conversion of the Organic Matter of Domanic Shale and Permian bituminous Rocks in Hydrothermal Catalytic processes. *Energy and Fuels* 31 (8):7789-99. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.7b00612.

DOI: 10.17223/9785946218412/483

ОСОБЕННОСТИ СОСТАВА ГАЗОВЫХ ЗАЛЕЖЕЙ СЕВЕРНЫХ И АРКТИЧЕСКИХ РАЙОНОВ ЗАПАДНОЙ СИБИРИ

¹Новиков Д.А., ¹Дульцев Ф.Ф., ¹Черных А.В., ¹Фурсенко Е.А.¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука

Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия

NovikovDA@ipgg.sbras.ru

В северных и арктических районах Западно-Сибирской нефтегазоносной провинции промышленная газоносность установлена в стратиграфическом диапазоне от газ-салинской пачки (турон-нижний коньяк) верхнего мела до верхней части палеозойского фундамента (интервал глубин выявленных залежей 500-4200 м). Уникальные запасы газа сосредоточены в отложениях апт-альб-сеноманского комплекса (Бованенковское, Ямбургское, Уренгойское и другие), при этом львиная доля запасов связана с отложениями сеномана. Основные запасы газа сконцентрированы на глубинах 1000-1500 м.

В настоящей работе впервые обобщены данные по составу 1984 газовых залежей (более 3000 анализов) северных и арктических районов Западной Сибири. Газы практически всех изученных залежей характеризуются преобладанием в составе (до 90-99 об. %) углеводородов метанового ряда (рисунок 1). В газах отсутствует сероводород, в малых количествах содержатся азот (0,8-3,0 об.%), за исключением Салмановского, Среднеямальского, Северо-Тамбейского и ряда других месторождений, где его концентрации достигают 7-15 об.%. Содержания углекислого газа не превышают 7 об.%, составляя в среднем 0,6 об.%. Количество гелия и аргона, в среднем, составляют 0,014 и 0,051 об.% соответственно. Иногда встречается водород (доли процентов). Газы продуктивных горизонтов отличаются друг от друга главным образом по содержанию тяжелых углеводородов (C_2H_6 +высшие). Их повышенное содержание связано с газами газоконденсатных залежей и находится в прямой зависимости от выхода конденсата.

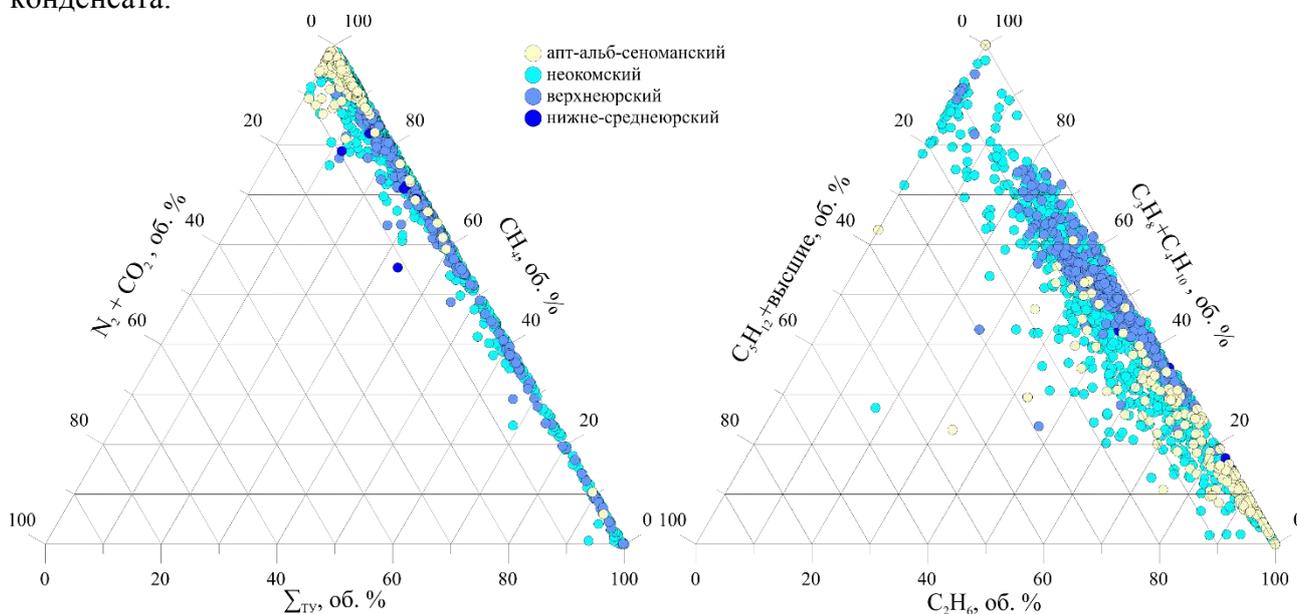


Рисунок 1 – Диаграммы общего состава газов и состава тяжелой углеводородной фракции свободных газов залежей северных и арктических районов Западной Сибири.

Исследования проводились при финансовой поддержке проекта ФНИ № 0331-2019-0025 «Геохимия, генезис и механизмы формирования состава подземных вод арктических районов осадочных бассейнов Сибири» и Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 18-05-70074 «Ресурсы Арктики».

DOI: 10.17223/9785946218412/484

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ И ОСОБЕННОСТЕЙ СОСТАВА НЕФТЕЙ СЕВЕРНЫХ ТЕРРИТОРИЙ ЗАПАДНОЙ СИБИРИ

¹Красноярова Н.А., ¹Чуйкина Д.И., ¹Серебренникова О.В., ²Дорофеева Н.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

²*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Томск, Россия*
natalex @ipc.tsc.ru, nv-dorofeeva@yandex.ru

Освоение природных ресурсов северных территорий является одной из первоочередных государственных задач, решение которой осложняется экстремальными климатическими условиями, слабой транспортной связанностью огромных территорий.

Целью исследования явилось изучение особенностей состава углеводородов и свойств нефтей 18 площадей Надым-Пурской, Пур-Тазовской, Ямальской и Гыданской нефтегазоносных областей. Нефти отобраны с широкого диапазона глубин (от 2066 до 4604 м) в разные годы. Состав углеводородов (УВ) определяли методом газожидкостной хромато-масс-спектрометрии (ГХМС) с предварительным разделением сырой нефти методом жидкостно-адсорбционной хроматографии на колонке с окисью алюминия IV степени активности. В качестве подвижной фазы использован гексан.

Характеристика физико-химических свойств нефтей представлена вязкостью, плотность, групповым составом (содержанием масел, смол, асфальтенов) и данными ИК-спектрометрии. ИК-спектры измерены в диапазоне 200-4000 см⁻¹ в тонком слое, по ним рассчитаны коэффициенты, характеризующие условное содержание алифатических, нафтеновых, ароматических и кислородсодержащих структур в нефти. Максимальное содержание масляных компонентов, представленных суммой парафиновых, нафтено-парафиновых, нафтено-ароматических и ароматических компонентов, характерно для нефтей В.Пурпейской, В.Таркосалинской, Ямсовейской площадей и составляет более 97 % мас. К наиболее смолистым нефтям относятся Ю.Вэнгапурская и Тагринская, доля смолисто-асфальтеновых компонентов составляет более 9 % мас. Все рассмотренные нефти характеризуются невысокими значениями плотности от 0,824 до 0,885 г/см³.

По данным ИК-спектроскопии нефти Самбургской, Ю.Вэнгапурской, Тагринской, площадей характеризуются высокой степенью ароматичности и повышенным содержанием кислородсодержащих структур. Эти нефти способствуют образованию хорошо растворимых в воде поверхностно-активных веществ, снижающих поверхностное натяжение на границы «нефть-вода». Повышенное содержание сульфоксидных групп отмечено для нефтей С.Толькинской, Вэнгаяхинской и Нейтинской площадей. Нефти Самбургского, Ю.Вэнгапурского и Заполярного месторождений имеют высокую степень разветвленности алифатических структур.

В составе УВ идентифицированы нормальные и изопреноидные алканы, циклогексаны, нафталины, фенантрены, сесквитерпаны, бифенилы, флуорены, гопаны. Зафиксировано доминирование биароматических структур над триароматическими, отсутствие во всех нефтях флуоренов. Сесквитерпаны не обнаружены только в вэнгаяхинской нефти.

Во всех нефтях преобладают ациклические соединения (76,71-98,45 % от суммы идентифицированных). Нефти Ямальской, Гыданской и Надым-Пурской НГО характеризуются молекулярно-массовым распределением n-алканов с максимумом в низкомолекулярной области (C₁₅-C₁₇). Для нефтей Пур-Тазовской НГО отмечено бимодальное распределение n-алканов (C₁₇ и C₂₅). Практически все нефти характеризуются повышенными значениями отношения пристана к фитану (П/Ф), что соответствует окислительным и субокислительным условиям формирования исходного ОВ.

DOI: 10.17223/9785946218412/485

**ЗАКОНОМЕННОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДНЫХ И
ГЕТЕРОАТОМНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В РАССЕЯННОМ ОРГАНИЧЕСКОМ
ВЕЩЕСТВЕ СЕВЕРА ЗАПАДНОЙ СИБИРИ**

Красноярова Н.А., Серебренникова О.В., Кульчаковская Е.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

*Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
canc@ipc.tsc.ru*

Характеристика рассеянного в породах органического вещества (ОВ) позволяет оценить его термическую преобразованность, основной источник биопродуцентов, специфику условий седиментации, а, следовательно, и перспективы нефтегазоносности изучаемой территории.

Изучены распределение и состав битуминозных компонентов в рассеянном органическом веществе ачимовского комплекса и отложениях юры на территории Нижнепуровского района ЯНАО Западной Сибири. Битумоиды выделяли из пород методом, описанным в [1]. Были исследованы распределение и состав металлопорфиринов, стеранов (St), терпанов (Ter), гопанов (H), периленов (Per), нормальных и изопреноидных алканов (Alk), нафталинов (N), фенантронов (P), дибензотиофенов (DBT) и дибензофуранов (DBF).

Углеводороды (УВ) и металлопорфирины были сконцентрированы хроматографическим разделением экстрактов на колонках с оксидом алюминия. Содержание металлопорфиринов и периленов определяли методом электронной спектроскопии по интенсивности полос поглощения при 550 нм (для Ni-p), 570 нм (для VO-p) и 435 нм (для периленов) с использованием в расчетах коэффициентов экстинкции $2.7 \cdot 10^4$, $2.9 \cdot 10^4$ и $4 \cdot 10^4$ л/моль·см, соответственно. Исследование состава и распределения УВ проведено единой методикой, подробно представленной в [2].

Содержание в породах битуминозных компонентов меняется в диапазоне от 0,033 до 1,53 %, свидетельствуя о перспективах нефтеносности отдельных участков разреза. Практически во всех образцах исследованной территории обнаружены металлопорфирины. Характер молекулярно-массового распределения n-алканов унимодальный с максимумом на C₁₇-C₁₈, что предполагает генерацию нефтей с низким содержанием парафина. Среди ароматических соединений доминируют нафталины (в среднем до 60 %). Содержание алкилбензолов составляет доли процентов (в среднем 0,43 %). Отмечено, что в ОВ всех исследованных пород дибензофуран преобладает над дибензотиофеном.

В нижней юре ОВ отлагалось в субокислительных условиях, в формировании его состава доминирующую роль играл фитопланктон. Обстановка осадконакопления в средней юре была окислительной. Низы сортымской свиты (берриас-валанжинский ярусы) отлагались в мелком море в восстановительной и субокислительной обстановках с основным источником ОВ фитопланктоном. В последующем обстановка осадконакопления менялась от окислительных до морских и мелководно-морских условий.

Осадки тангаловской свиты (валанжинский и аптский ярусы), перекрывающей сортымскую, накапливались, видимо, озерных условиях, в субокислительной среде, седиментация происходила вблизи береговой линии моря или в прибрежном водоеме, периодически заливаемом морем. Органический материал поставлялся в осадок преимущественно фитопланктоном.

1. Organic Geochemistry Standard analytic procedure requirement and reporting guide. Statoil, 1988. P. 2231-2238
2. Красноярова Н.А., Серебренникова О.В., Соболев П.Н. Geochemical investigation of organic matter of Riphean deposit rocks of the Ust'-Mayskaya well (Aldan antecline) // AIP Conference Proceeding. – V. 2051. – P. 020147.

DOI: 10.17223/9785946218412/486

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУЙНОГО РАЗМЫВА ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЙ ЗАТОПЛЕННОЙ ТУРБУЛЕНТНОЙ СТРУЕЙ

Никульчиков А.В., Никульчиков В.К., Солоненко В.А.

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

nikulchikov@sibmail.com, vik@niipmm.tsu.ru

При эксплуатации нефтяных резервуаров часто возникает проблема отложения твердых частиц и тяжелых парафинистых осадков на днище резервуара [1]. Существенный интерес представляют винтовые устройства, размывающие донные отложения с помощью турбулентной струи.

Цель работы:

- 1) расчет гидродинамических характеристик турбулентной затопленной струи в резервуаре при различных температурах нефти;
- 2) определение реологических параметров нефти, при которых возможно размывание донных отложений в резервуаре.

При проведении расчетов трехмерной задачи применялся метод конечных объемов с использованием программного комплекса ANSYS CFX. Было построено две конечно-объемные модели: модель винта «Диоген» для определения характеристик затопленной струи и конечно-объемная модель нефтяного резервуара [2].

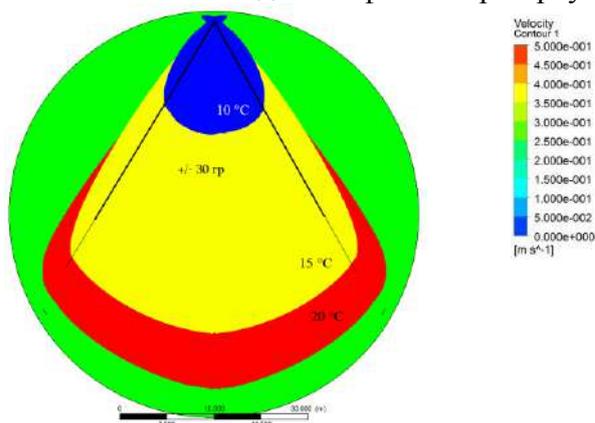


Рис. 1. Область размыва, формируемая одним винтом «Диоген» при различных температурах нефти. Синим обозначена область при $t=10^{\circ}\text{C}$, желтым при $t=15^{\circ}\text{C}$, красным при $t=20^{\circ}\text{C}$. Область размыва изображена с учетом возможности поворота вала винта в пределах $\pm 30^{\circ}$

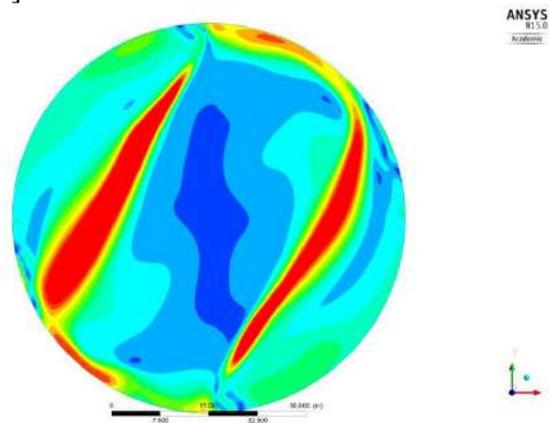


Рис.2. Полученное в ходе исследования поле скоростей при температуре нефти 20°C в случае использования двух винтов «Диоген». Здесь красным обозначены скорости более $4,5 \text{ м/с}$, желтым – более $3,5 \text{ м/с}$, синим – менее $0,5 \text{ м/с}$. Диаметр резервуара – 60 м .

По результатам моделирования можно сделать следующие выводы:

- 1) Размыв донных отложений возможен при температуре нефти не ниже 15°C (скорость потока жидкости более $0,5 \text{ м}$ на расстоянии 60 м). При более низких температурах размыва достичь не удастся.
- 2) Для устранения застойных зон, находящихся вблизи стенок резервуара, в обязательном порядке необходимо применение нескольких устройств, установленных симметрично по периметру первого яруса резервуара

1. Gopang I.A., Mahar H., Jatoi A.S., Akhtar K.S., Omer M., Azeem M.S. Characterization of the sludge deposits in crude oil storage tanks// Journal of Faculty of Engineering & Technology, vol. 23(1) (2016), p 57-64.
2. Применение системы ANSYS к решению задач механики сплошной среды. Практическое руководство / Под ред. проф. А. К. Любимова - Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2006. 227 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/487

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИЧИН ОБРАЗОВАНИЯ СТОЙКИХ ЭМУЛЬСИЙ НА
УСТАНОВКЕ ПОДГОТОВКИ НЕФТИ**

Ковальчук А.А., Косицына С.С., Бурюкин Ф.А.

¹*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет», Красноярск, Россия
skositsyna@sfu-kras.ru*

Считается, что наиболее остро вопрос повышения эффективности установок промышленного обезвоживания и обессоливания стоит для компаний, добывающих тяжелую высоковязкую нефть. Однако ряд месторождений Восточной Сибири, продукция которых характеризуется низкой плотностью, вязкостью, крайне низким содержанием асфальтенов, сталкивается с осложнениями на установках подготовки нефти, которые проявляются в образовании стойких гелеобразных множественных («ловушечных») эмульсий. Данные эмульсии трудно разрушаются традиционными способами и стабилизируются эмульгаторами буровых растворов, попадающих в пластовый флюид после поглощения породой буровых жидкостей в процессе разработки скважин. Для минимизации негативных эффектов, связанных с засорением технологического оборудования и накопления межфазного эмульсионного слоя в резервуарах были проведены исследования и предложены рекомендации по модернизации схемы установки подготовки нефти (УПН).

Модернизированная схема базируется на результатах разработок [1-2], в которых для интенсификации разделения эмульсий в продукцию предлагается вводить водяной пар и использовать различные методы турбулизации. Разгазированная и частично обезвоженная после трехфазных сепараторов водно-нефтяная смесь подается в печь подогрева нефти, после которой технологическим трубопроводом направляется в работающие параллельно отстойники. На участке трубопровода между печью и отстойником устанавливается технологический патрубок, через который подается перегретый водяной пар среднего давления, получаемый на передвижной паровой установке. За счет подачи водяного пара с температурой 150 °С и давлением в среднем на 0,2-0,4 МПа выше, чем в трубопроводе, обеспечивается интенсивное перемешивание нефти и пара, что повышает эффективность разрушения бронирующих оболочек деэмульгатором, введенным в эмульсию перед трехфазным сепаратором, а сконденсированная влага укрупняет диспергированные капли воды и выполняет промывочную функцию для удаления растворенных солей. Для снижения ударной нагрузки на трубопровод и интенсификации перемешивания пар вводится тангенциально одним потоком. Для интенсификации внутритрубной деэмульсации в том числе и за счет действия центробежных сил, возможно применение различных контактных устройств [3] на трубопроводе сразу после места установки патрубка для ввода пара. Экспериментальная оценка рассматриваемой схемы повышения эффективности разделения водо-нефтяной эмульсии показала, что даже кратковременная продувка перегретым водяным паром либо углеводородными газами в объемном соотношении 0,1 м³/м³ мин позволила при последующем отстаивании увеличить объем выделившейся свободной воды на 10-20% в зависимости от обводненности исходной эмульсии.

1. Патент РФ 2162725 Способ подготовки нефти к переработке и установка для ее осуществления // Заявл. 2000109656/12, 17.04.2000 / Пахотин Г.Л., Пахотин Л.Г., Пахотин К.Г., Пахотина Л.Ф.
2. Патент 2417245 Способ обезвоживания высокоустойчивых водоуглеводородных суспензий и унифицированный комплекс для его реализации // Заявл. 2009115211/04, 21.04.2009 / Хуснутдинов И.Ш., Заббаров Р.Р., Копылов А.Ю., Ханова А.Г.
3. Патент РФ 2356596 Устройство для разрушения водно-нефтяной эмульсии при транспортировании по трубопроводу // Заявл. 2008105505/15, 2008.02.12 / Гумовский О.А., Сахабутдинов Р.З., Космачёва Т.Ф.

DOI: 10.17223/9785946218412/488

ТЕСТИРОВАНИЕ ПАВ ДЛЯ МЕТОДОВ УВЕЛИЧЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ В УСЛОВИЯХ КАРБОНАТНЫХ ПЛАСТОВ С ВЫСОКОЙ МИНЕРАЛИЗАЦИЕЙ И ЖЕСТКОСТЬЮ ПЛАСТОВОЙ ВОДЫ

Ломпик В.А., Бурюкин Ф.А., Дадакин Н.М.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия
fburyukin@sfu-kras.ru

Использование водных растворов поверхностно-активных веществ (ПАВ) в качестве вытесняющего агента при заводнении нефтяных пластов позволяет значительно повысить нефтеотдачу и увеличить эффективность выработки запасов. Однако применение таких растворов ограничено в карбонатных объектах с пластовой водой высокой жесткости и минерализации. Обусловлено это тем, что наиболее распространённые анионоактивные ПАВ сильно адсорбируются на поверхности породы коллектора [1], что приводит к потере ПАВ из раствора и снижению его эффективности. В присутствии ионов жесткости в пластовой воде теряется способность ПАВ уменьшать межфазное натяжение на границе вода – нефть и смачиваемость породы [2]

В данной работе в качестве альтернативы широко используемым анионоактивным, рассмотрено и протестировано применение других категорий ПАВ: модифицированных, катионоактивных, амфотерных и неионогенных. Эксперименты проводили на примере месторождения Восточной Сибири, пласты которого представлены карбонатной породой (доломит), а общая минерализация пластовой воды достигает 435 мг/л с содержанием ионов Ca^{+2} и Mg^{+2} до 96 г/л и 13 г/л соответственно. Способность ПАВ сохранять свои свойства оценена по величине межфазного натяжения с ростом минерализации и жесткости воды.

Результаты исследований приведены на рисунке 1.

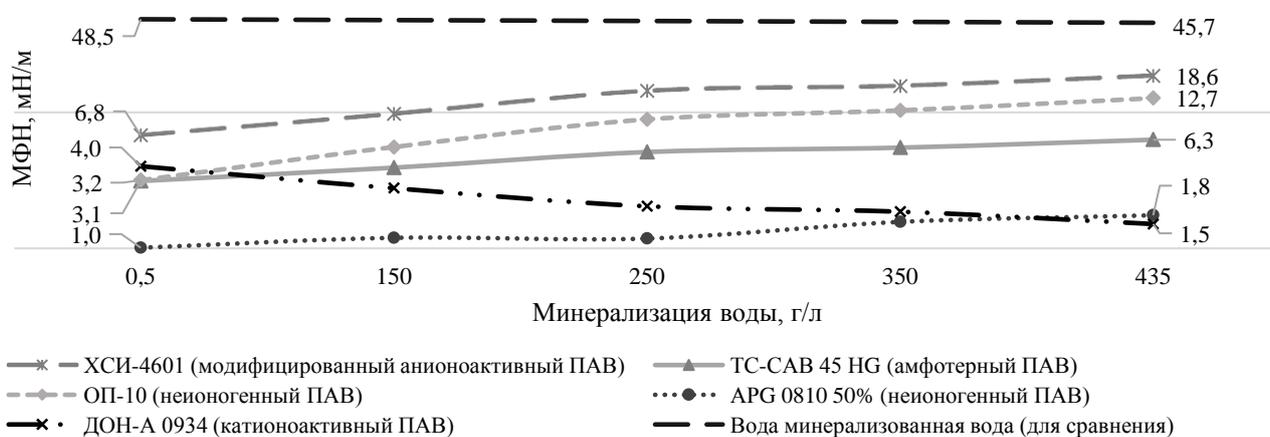


Рисунок 1 – Зависимость межфазного натяжения на границе нефть-раствор ПАВ для исследованных образцов (МНФ – межфазное натяжение).

В результате выполненных экспериментов показана применимость отдельных видов ПАВ в жестких пластовых условиях, выявлен рост эффективности катионоактивных ПАВ с ростом минерализации пластовой воды. Целесообразно установление зависимости адсорбции различных типов ПАВ от общей минерализации и ионного состава пластовой воды для данных условий.

1. Рузин Л.М., Морозюк О.А. Методы повышения нефтеотдачи пластов, Ухта: УГТУ, 2014.
2. Сургучев М.Л. Вторичные и третичные методы добычи, Москва: Недра, 1985.

DOI: 10.17223/9785946218412/489

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ В ПРИСУТСТВИИ НАНОРАЗМЕРНОГО ОКСИДА ЖЕЛЕЗА (II, III) ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ВОДЯНОГО ПАРА

Ситнов С.А., Мухаматдинов И.И., Шмелева Э.И., Долгих С.А.

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия
public.mail@kpfu.ru*

В настоящее время особенно важным и актуальным представляется повышения эффективности существующих методов увеличения нефтеотдачи, в частности тепловых с использованием водяного пара. Применение катализа на стадии разработки месторождений нетрадиционных углеводородов, в частности, сверхвязких и битуминозных нефтей позволит решить данную задачу [1].

Данная работа посвящена изучению преобразования нефти в составе песчаника, отобранного с Ашальчинского месторождения, разрабатываемого с применением паротепловых технологий, в присутствии наноразмерного катализатора на основе оксида железа (II, III) в комплексе с донором водорода [2]. Моделирование осуществлялось в реакторе высокого давления при различной температуре воздействия на образец керн в среде водяного пара.

В таблице 1 представлены зависимость изменения группового состава (по методу SARA) исходного экстракта и продуктов каталитического преобразования, извлеченных из породы, при различной температуре и продолжительности паротеплового воздействия 24 ч.

Таблица – Групповой состав нефти после паротеплового воздействия в присутствии катализатора при различной температуре (продолжительность - 24 ч)

Объекты	Групповой состав (SARA), % масс.			
	Насыщенные углеводороды	Ароматические соединения	Смолы	Асфальтены
Исходный экстракт	39,2	30,1	25,5	5,3
<i>Продукты каталитического преобразования нефтей в среде водяного пара</i>				
Опыт при 200°C	40,1	30,3	23,2	6,4
Опыт при 250°C	61,7	27,9	8,9	1,5
Опыт при 300°C	40,6	45,0	12,1	2,3

Результаты свидетельствуют о том, что наибольший каталитический эффект в аспекте снижения доли асфальто-смолистых веществ и обогащения более лёгкими фракциями достигается при температурах выше 200 °С, причем температура оказывает влияние на характер реакций крекинга и гидрогенолиза, катализируемых наночастицами оксида железа в совокупности с активными центрами породообразующих минералов.

1. Maity S. K., Ancheyta J., Marroquim G. Catalytic Aquathermolysis Used for Viscosity Reduction of Heavy Crude Oils: A Review // Energy & Fuels. – 2010. – V. 24. – P. 2809–2816.
2. Sitnov S.A., Mukhamatdinov I.I., Shmeleva E.I., Aliev F.A., Vakhin A.V. Influence of nanosized iron oxides (II, III) on conversion of biodegraded oil // Petroleum Science and Technology. – 2019. – V.37(8). – P. 971-976.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ (кандидаты наук), проект 075-02-2018-110, а также за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

DOI: 10.17223/9785946218412/490

СОСТАВ АСФАЛЬТЕНОВ МАЗУТА УСИНСКОЙ НЕФТИ

Чешкова Т.В., Арышева А.Д.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
sanc@ipc.tsc.ru

Мазут, получаемый на малотоннажных нефтеперерабатывающих установках России, используется преимущественно в качестве котельного топлива [1]. Одной из причин, осложняющей процесс его переработки, является высокое содержание (до 20 мас. %) асфальтенов, в молекулах которых концентрируется значительная часть металлов и гетероатомов, присутствующих в исходном сырье [2]. Поэтому накопление и обобщение данных об особенностях состава и структуры асфальтеновых веществ имеет значение для выбора эффективных технологий переработки остаточных нефтяных фракций. Опубликованные в литературе сведения, отражающие уровень исследований в этой области, касаются, главным образом, структурно-групповых характеристик асфальтенов [3,4]. В данной работе приведены результаты изучения строения асфальтенов мазута тяжелой нефти Усинского месторождения с помощью метода селективной химической деструкции, который позволяет установить детали «блоков», участвующих в построении макромолекул асфальтенов, в частности, получить данные о наличии С-S, С-O мостиковых связей в их структуре и определить качественный состав «связанных» фрагментов. По данными хромато-масс-спектрометрии в составе «эфиросвязанных» соединений в макромолекулах исследуемых асфальтенов присутствуют н-алканы (m/z 57), циклопентаны (m/z 68,69) и циклогексаны (m/z 82,83), представленные гомологическими рядами $C_{16}-C_{26}$, $C_{10}-C_{16}$ и $C_{15}-C_{20}$, соответственно. Через сульфидные мостики в макромолекулах асфальтенов мазута связаны $C_{15}-C_{33}$ н-алканы, $C_{17}-C_{27}$ циклогенксаны, $C_{16}-C_{19}$ фенилалканы (m/z 91) с различным положением фенильного заместителя в алкильной цепи, $C_{17}-C_{19}$ н-алкилбензолы (m/z 91, 92), $C_{16}-C_{19}$ алкилтолуолы (m/z 105), $C_{17}-C_{19}$ алкилксилолы (m/z 119), C_0-C_4 фенантрены (m/z 178;192–234) и $C_{15}-C_{19}$ метиловые эфиры алифатических кислот (m/z 74).

Установленное различие в наборе идентифицированных соединений, вероятнее всего, связано с особенностями структуры исходных асфальтенов тяжелой усинской нефти [5]. Можно предположить, что большая часть «эфиросвязанных» фрагментов находится на периферии их макромолекул и поэтому в большей степени подвергается разрушению на стадии получения мазута в процессе атмосферной перегонки нефти.

1. Копытов М.А., Головки А.К. Термический крекинг мазута в присутствии магнитных фракций микросфер энергетических зол // Известия Томского политехнического университета, Инжиниринг георесурсов–2009. – Т. 315– № 3. С. 83–86.
2. Сергиенко С.Р., Таимова Б.А., Талалаев Е.И. Высокомолекулярные неуглеводородные соединения нефти. – М.: Наука.1979.– 269 с.
3. Копытов М.А., Головки А.К. Изменение структурно-групповых характеристик смол и асфальтенов тяжелых нефтей в процессе первичной преработки // Нефтехимия–2017. –Т. 57. –№ 1.С. 41–48.
4. Galukhin* Andrey V., Erokhin Anton A., Osin Yuri N., and Danis K. Nurgaliev Catalytic Aquathermolysis of Heavy Oil with Iron Tris(acetylacetonate): Changes of Heavy Oil Composition and in Situ Formation of Magnetic Nanoparticles // *Energy Fuels*. – 2015. – 29 (8). P. 4768–4773.
5. Сергун В.П., Чешкова Т.В., Сагаченко Т.А., Мин Структурные фрагменты, содержащие сульфидные и эфирные связи в молекулах высоко- и низкомолекулярных асфальтенов тяжелой нефти месторождения Усинское // Нефтехимия. – 2016. – Т. 56. – № 1. – С.13–18.

DOI: 10.17223/9785946218412/491

**НОВАЯ КОНСТРУКЦИЯ ОБОРУДОВАНИЯ ДЛЯ ЛИКВИДАЦИИ
НЕГЕРМЕТИЧНОСТИ НЕФТЯНЫХ И ГАЗОВЫХ СКВАЖИН**

¹Ваганов Р.А., ¹Агровиченко Д.В., ²Жуков М.В.

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет», Красноярск, Россия

²Общество с ограниченной ответственностью «СтройСпецКомплектГрупп», Красноярск
rvaganov@sfu-kras.ru, zhukovmv@ssk-group.com

Вопрос разработки новых технических средств, которые могут эффективно применяться для решения проблем, связанных с негерметичностью эксплуатационных колонн, является весьма актуальным, в особенности с учетом роста фонда скважин на поздней стадии разработки. Несмотря на то, что тампонирующее до сих пор является основным методом ликвидации негерметичности эксплуатационной колонны, имеются многочисленные сообщения о его недостаточной эффективности и необходимости неоднократного повторения процедуры. Широко используемая технология ликвидации негерметичности путем спуска в скважину дополнительной эксплуатационной колонны и последующее цементирование не лишена недостатков, основными из которых являются высокая стоимость ремонтно-изоляционных работ и снижение проходного сечения скважины. Для ограничения водопритоков в скважинах, которые имеют локальные единичные нарушения протяженностью обычно более 20 м, чаще применяют технические средства, такие как профильные перекрыватели, металлические пластыри и пакеры либо двухпакерные компоновки различных конструкций. К недостаткам большинства из них относят непродолжительный период сохранения герметичности, повышенные требования к подготовке скважины и для некоторых случаев – повышенную аварийную опасность, когда как например установка в составе насосного оборудования отсекающего пакера, который устанавливается ниже негерметичности эксплуатационной колонны и в процессе эксплуатации присыпается шламом из поврежденного интервала [1].

Предлагается при решении данной проблемы использовать метод тампонирующего эксплуатационной колонны в интервале негерметичности с надежной гидроизоляцией ниже и выше самого интервала негерметичности специальной компоновкой тампонирующего пакера, имеющего канал для прохождения кабеля установки электроцентробежного насоса. В данной системе канал для прохождения кабеля имеет функцию обеспечения сообщения надпакерного и подпакерного пространства, что решает вопросы отвода газа при эксплуатации, проведения технологических промывок, глушения. Согласно проведенной технико-экономической оценке стоимость ближайших аналогов (пакерные системы с герметичным кабельным вводом и двухпакерные компоновки компаний «НКМЗ», «НПФ Пакер», «Сибнефтемаш»); выше планируемой цены разрабатываемого оборудования на 5 – 15%, а стоимость аналогов иностранных производителей выше на 300 %.

При внедрении этого оборудования можно значительно продлить срок эксплуатации скважин, сохранить ее режимные параметры и потенциал, существенно сократить время и стоимость ремонта скважин.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках Федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 - 2020 годы», мероприятие 1.3 Уникальный идентификатор работ (проекта) RFMEFI57817X0236.

1. Фариз Ахмед, Алиев Ш.Г., Искендеров Э.Х. Состояние и проблемы по устранению негерметичности эксплуатационных колонн в скважинах месторождения БУЗОВНА–МАШТАГА // Розвідка та розробка нафтових і газових родовищ. 2015. № 3(56) – С.141–144.

DOI: 10.17223/9785946218412/492

РАЗРАБОТКА И ИСПЫТАНИЕ НОВЫХ МЕЧЕННЫХ КРАСИТЕЛЕМ ПОЛИАМФОЛИТНЫХ ТРАССЕРОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МЕЖСКВАЖИННОГО ПРОСТРАНСТВА М/Р ВОСТОЧНЫЙ МОЛДАБЕК

^{1,2} Сигитов В.Б., ^{1,2}Гусенов И.Ш., ¹Сабиров Р.А., ¹Ибрашев К.Н., ^{1,2}Кудайбергенов С.Е.

¹АО «Казахстанско-Британский Технический Университет»,

Алматы, Республика Казахстан

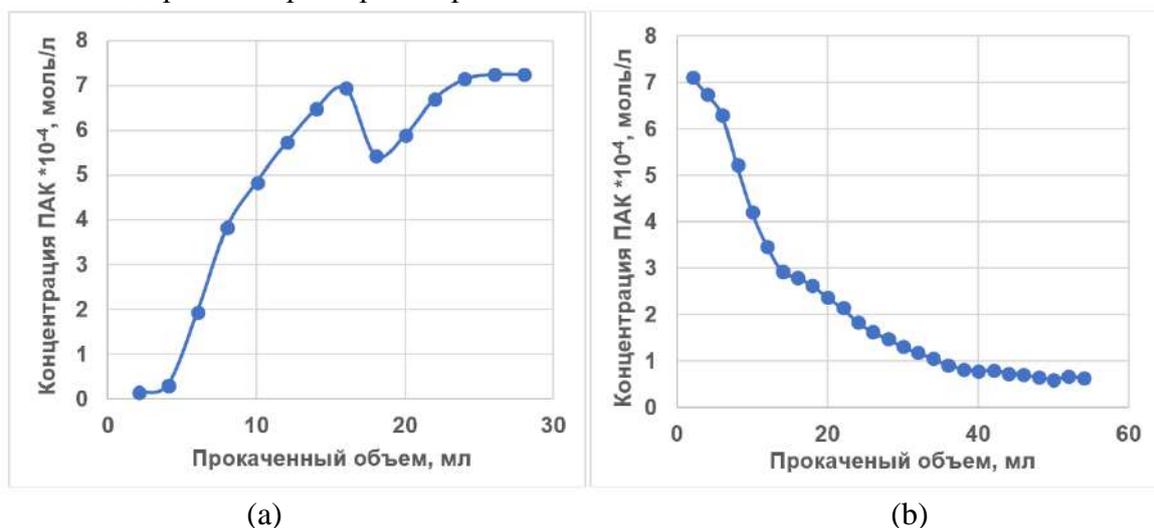
²ЧУ "Институт полимерных материалов и технологий", Алматы, Республика Казахстан

m.gabdullin@kbtu.rz, skudai@mail.ru

Трассерные методы исследования нефтяных пластов являются наиболее доступными прямыми методами получения достоверной информации о фильтрационных свойствах межскважинного пространства и, соответственно, способом повышения эффективности разработки зрелых месторождений с применением искусственного заводнения [1]. Однако традиционно применяемые низкомолекулярные трассеры дороги, чувствительны к высокому содержанию солей, температуре и рН среды, требуют применения высоких концентраций вследствие сорбции породой и пограничными слоями водно-нефтяных эмульсий [2].

В работе представлены данные по синтезу и исследованию принципиально новых трассеров на основе полиамфолитов (ПА), в состав которых, наряду с кислотными и основными звеньями, входят фрагменты красителя (ПАК). Способность ПА к конформационным переходам типа глобула-клубок при изменении внешних условий обеспечивает устойчивость ПАК к высокому содержанию солей, температуре и рН среды, а также снижению сорбции трассера ПАК функциональными группами горной породы.

На рисунке 1 показана усредненная зависимость концентрации трассера ПАК от прокачанного объема на выходе из образца керна м/р Восточный Молдабек. Как видно из рис. 1а, максимальная концентрация трассера ПАК достигает величины $7 \cdot 10^{-4}$ моль/л после прокачки 15 мл, то есть 30% трассера остается в керне. После прокачки 50 мл воды (рис. 1б) остаточное содержание трассера в керне снижается до 4%.



(a)

(b)

Рисунок 1 – Зависимость концентрации трассера ПА-К от прокаченного объема на выходе из керна до (а) и после (б) вытеснения трассера водой

Данные показывают, что разработанный трассер ПАК обладает высокой эффективностью.

1. Соколовский Э.В., Соловьев Г.Б., Тренчиков Ю.И. Индикаторные методы изучения нефтегазоносных пластов. - М.: Недра, 1986. -157 с.
2. Трунов Н.М. Патент 1310419 СССР, SU 1310419 A1 4 С 09 К 11/06. Способ исследования динамических процессов в жидкой среде / СССР N3768940 23-26; Заявл. 18.07.84; опубл. 15.05.87. Бюлл. N18. 5с.

DOI: 10.17223/9785946218412/493

**ВАРИАЦИИ СОСТАВА ИЗВЛЕКАЕМОЙ НЕФТИ УГУТСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ
ХАНТЫ-МАНСКИЙСКОГО АВТОНОМНОГО ОКРУГА**

Муравская Ю.А., Туров Ю.П., Гузняева М.Ю.

*Бюджетное учреждение высшего образования Ханты-Мансийского автономного
округа-Югры «Сургутский государственный университет», Сургут, Россия*

Julia_Kartyukova@mail.ru

Как известно, состав извлекаемой нефти в процессе эксплуатации месторождений способен изменяться и в большинстве случаев эти изменения имеют существенный характер. Эти изменения могут приводить к снижению технологических характеристик добываемого углеводородного сырья и поэтому требуют хотя бы периодического контроля во избежание нарушений контрактных условий в части требований к качеству и материальному составу поставляемого продукта. Не менее существенным является процесс нефтеизвлечения, режимы которого во многом определяются характеристиками извлекаемого флюида. Оценка степени «сработанности» отдельных скважин и месторождений в целом, а также корректировка и переоценка запасов эксплуатируемых месторождений нуждаются в данных о фактических актуализированных на момент мероприятия характеристиках состава извлекаемой нефти.

В данной работе исследованы вариации группового, гомологического и изомерного состава проб нефти Угутского месторождения, отобранных на устье скважин с различными сроками эксплуатации, а также изменения состава извлекаемой нефти с течением времени по результатам периодического отбора проб из одних и тех же скважин. Для корректного сопоставления состава различных образцов была проведена оценка суммарной погрешности в результатах многостадийных анализов, включающих погрешности пробоотбора, фракционирования нефти методом колоночной адсорбционной хроматографии и финальных стадий анализа методами оптической и рентгеновской спектроскопии, газо-жидкостной хроматографии и хроматомасс-спектрометрии.

Показано, что суммарные погрешности определения относительных содержаний изомеров насыщенных и ароматических веществ не превышают 6% отн, а погрешности в рассчитанных по их составу и используемых для решения геохимических задач так называемых «геохимических индексах» или «геохимических параметрах» не мешают идентифицировать источник образца – конкретную скважину, из которой он был отобран.

Скорость изменения состава максимальна в начале эксплуатации скважин – за первый год некоторые характеристики состава изменяются на более чем 10% от их первоначального значения. Например, соотношение между содержаниями 1-метилнафталина и 2-метилнафталина изменялось на 8%, а для некоторых изомеров алкилфенантронов – на 12%.

Одной из возможных причин таких изменений могут быть различия в скоростях фильтрации изомеров через пористую среду. Это было показано при моделировании фильтрации нефтяного флюида методом нормально-фазовой ВЭЖХ в экспериментах на колонке с сорбентом KromaSil 100 и гексаном в качестве подвижной фазы. Времена удерживания некоторых изомеров с одинаковой массой различались более чем на 20%.

Таким образом, изменение состава извлекаемой нефти в процессе эксплуатации нефтяных скважин можно сопоставить с изменением состава элюата в варианте фронтальной жидкостной хроматографии.

В общей картине наблюдаемых вариаций состава нефти находит отражение изменение физико-химических условий и характеристик продуктивного пласта в призабойной зоне скважин, которые вызывают перестройку структуры термодинамически неравновесной нефтяной системы и приводят к изменению состава извлекаемого нефтяного флюида.

DOI: 10.17223/9785946218412/494

QUENCHED POLYAMPHOLYTES FOR POLYMER FLOODING

Mukhametgazy N., Gussenov I., Kudaibergenov S.

*Institute of Polymer Materials and Technology. Almaty, Kazakhstan**Kazakh National Research Technical University after K.I. Satbayev. Almaty, Kazakhstan**skudai@mail.ru*

Polyampholyte type terpolymers were synthesized via conventional bulk free radical polymerization. Totally charged monomers such as 2-Acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid sodium salt (AMPSNa) and (3-Acrylamidopropyl)trimethylammonium chloride (APTAC) in combination with nonionic acrylamide (AAm) were used to prepare different compositions. Polyampholytes with different molar content: AAm 50-APTAC 25-AMPSNa 25, AAm 60-APTAC 20-AMPSNa 20, AAm 70-APTAC 15-AMPSNa 15, AAm 80-APTAC 10-AMPSNa 10 and AAm 90-APTAC 5-AMPSNa 5 are expected to improve their viscosifying ability, in high salinity media, which is attributed to the polyampholyte character of terpolymers [1].

Sand pack flooding was conducted to test the ability of the synthesized polymers to displace viscous East Moldabek (Kazakhstan) oil (140cp) out of high permeability porous media (16 Darcy). Initially the model was saturated with brine (100g/L salinity) and oil. Water flooding displaced 33% of oil. The figure 1 presents the results of the polymer flooding.

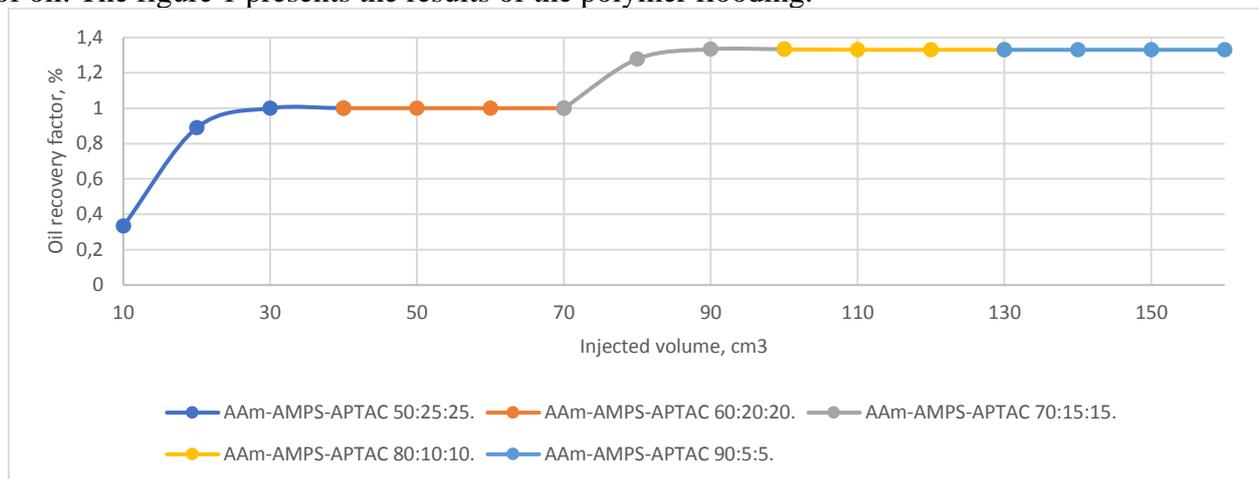


Figure 1 – Oil recovery vs polymer injected volume. Polymer concentration 0.5% in 100g/L brine. Flow rate 0.1cm³/min. Room temperature. 1 pore volume is around 50cm³.

As it can be seen, the injection of AAm-AMPS-APTAC 50:25:25 and 70:15:15 allowed to achieve 1 and 0.3% incremental oil recovery, respectively. This is not a substantial increment. However, we can expect better performance in layered heterogeneous models with lower oil viscosity [2]. Another test has been done by using 30% hydrolyzed 17mln Da polyacrylamide solution in 15g/L NaCl. Incremental oil recovery was equal to 5% versus 1.3% achieved by the polyampholytes. Future research will aim comparison between polyacrylamide and polyampholytes at higher salinity, temperature and reservoir heterogeneity conditions.

1- Dai C, Xu Z, Wu Y, et al. Design and Study of a Novel Thermal-Resistant and Shear-Stable Amphoteric Polyacrylamide in High-Salinity Solution. *Polymers (Basel)*. 2017;9(7):296. Published 2017 Jul 21. doi:10.3390/polym9070296.

2- Seright, R. S. (2016, April 11). How Much Polymer Should Be Injected During a Polymer Flood? *Society of Petroleum Engineers*. doi:10.2118/179543-MS.

DOI: 10.17223/9785946218412/495

РЕОКИНЕТИКА ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ НЕФТЯНЫХ И ГЕЛЕОБРАЗУЮЩИХ СИСТЕМ

Кожевников И.С., Богословский А.В., Алтунина Л.К.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
bav@ipc.tsc.ru*

Добыча трудноизвлекаемых нефтей зачастую сопровождается термическим воздействием и закачкой в пласт специально разработанных композиций. Происходящие при этом фазовые превращения приводят к изменению текучести углеводородной жидкости и контактирующего с ней закачиваемого раствора. Принципиальное значение имеет определение момента потери текучести – точка гелеобразования.

На сегодняшний день фазовый состав и реология нефтяных систем и закачиваемых жидкостей изучены весьма подробно, однако, накопленная информация относится в основном к статическому состоянию рассматриваемых объектов. Кинетике изменения текучести, превращению зелей в гель, уделялось меньше внимания. Причиной этого является уровень развития соответствующей техники эксперимента.

Из существующих методов только вибрационная вискозиметрия может использоваться как в области маловязких ньютоновских жидкостей, так и в области твердообразного состояния вещества. Она имеет необходимое для кинетических измерений быстрое действие, а малая амплитуда колебаний зонда не разрушает формирующуюся структуру. Однако, использованию вибрационного метода в области потери текучести контролируемого образца препятствует весьма важное ограничение – условие бесконечности размеров контролируемой среды. Волновой резонанс, возникающий при нарушении указанного условия, было предложено использовать для определения точки гелеобразования как области расхождения реокинетических зависимостей, получаемых для идентичных образцов в измерительных сосудах разной величины [1]. В настоящей работе продемонстрирована возможность использования предложенного способа в ситуациях, которые приводят к возникновению «твердообразных» объектов в технологических процессах добычи и транспорта нефти:

- при застывании нефти с понижением температуры,
- в процессах формирования неорганических гелей из частиц коллоидной дисперсности,
- в процессе структурообразования полимерных составов.

Точки потери текучести, определенные по [1], для исследованных нефтей практически совпадают с результатами определения температуры застывания по ГОСТ 20287-91, а для исследованных гелеобразующих систем – с определенными визуально по подвижности образца в пробирке, точками гелеобразования.

При увеличении размера измерительного сосуда, максимумы зависимостей смещаются в сторону более прочной структуры, а их экстраполяция в область более высоких температур, демонстрирует соответствие значениям вязкости, полученным методом капиллярной вискозиметрии.

1. Богословский А.В., Галкин В.М., Кожевников И.С. Определение момента гелеобразования с использованием измерительных сосудов разной величины // Газовая промышленность, 2013. № 11, С. 98 – 100.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, в рамках ФЦП,
Соглашение №14.604.21.0176, уникальный идентификатор – RFMEFI60417X0176.*

DOI: 10.17223/9785946218412/496

ИЗОЛЯЦИЯ ВОДОПРИТОКА В НЕФТЯНЫХ СКВАЖИНАХ МЕТОДОМ ГАЗОДИФФУЗИОННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Воробьёв А.К., Черкасов А.В., Кодолов В.В., Курбатов А.В.

Акционерное общество «Федеральный научно-производственный центр «Алтай»,

Бийск, Россия

post@frpc.secna.ru

При эксплуатации скважин по добыче нефти возникают ситуации, когда из отдельных пластов или их интервалов в скважину начинает поступать вода, которая смешивается с нефтью. Очистка от воды нефти, добытой из таких скважин, является трудоемкой и дорогостоящей процедурой. Поэтому приток воды из таких слоев или интервалов перфорации стараются изолировать.

В ФНПЦ «Алтай» ведутся работы по созданию бескорпусного твердотопливного газогенератора (ГГ) для направленной изоляции водопритоков в скважинах, отключения отдельных пластов или их интервалов путем газодиффузионного воздействия.

Газогенератор опускается в скважину на каротажном кабеле в зону водопритока и воспламеняется. При сгорании топлива выделяется большое количество конденсата, который вместе с газами попадает в обводненные пласты, химически реагирует с составляющими горных пород и образует с ними прочное адгезионное соединение, слабо разрушающееся под воздействием кислот. Таким образом, образуется водонепроницаемый экран, выдерживающий большое противодавление (рисунок 1).

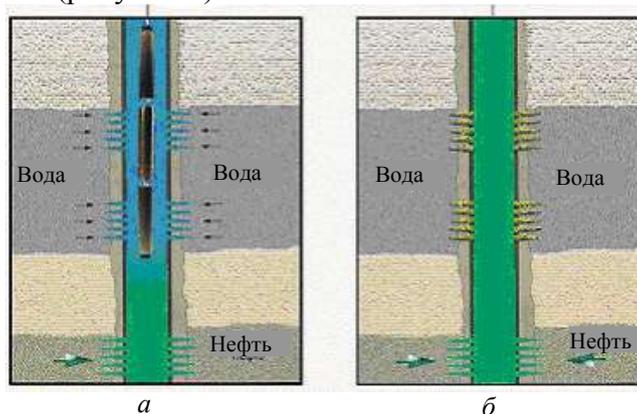


Рисунок 1 – Результаты изоляции водопритока газодиффузионным методом до обработки (а) и после обработки (б)

Основные нефтеносные пласты находятся в песчаниках ($50\div 80\%$ SiO_2) и известняках ($30\div 80\%$ CaO), поэтому конденсат, образованный при горении топлива ГГ (оксиды металлов), может взаимодействовать с этими составляющими горных пород. Расплавленный оксид металла переносится газообразными продуктами сгорания топлива в перфорационные каналы и трещины, взаимодействует с SiO_2 и CaO и дает на границе соприкосновения с пластом более низкотемпературный эвтектический расплав, способный при кристаллизации обеспечить адгезию между оксидом металла и горной породой. В области температур $650\div 1600$ °С имеется достаточное количество систем, способных давать расплав с кремниевой и кальциевой основой горных пород, которые после охлаждения будут образовывать прочное сцепление с этими породами. Температура плавления оксидов для этих систем лежит ниже 2000 °С, т.е. синтезированные в процессе горения топлива, они будут находиться в расплавленном состоянии. Необходимо также учитывать, что скважинная жидкость представляет собой смесь нефти, пресной или минерализованной воды, и, кроме этого, возможны кислотные обработки соседних пластов, поэтому системы оксидов должны быть кислотостойкими.

DOI: 10.17223/9785946218412/497

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ВОДОНЕФТЯНОЙ ЭМУЛЬСИИ НА ДИНАМИКУ ПРОЦЕССА ОТСТАИВАНИЯ

Кузьменко Е.А., Мойзес О.Е., Марченко М.Е.

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Томск, Россия
kea@tpu.ru*

Нефть, добываемая из скважин, содержит воду, преимущественно в эмульгированном состоянии. Задача разрушения водонефтяных эмульсий и эффективного обезвоживания нефти на промыслах остается актуальной и требует экспериментальных исследований в этой области. Поэтому целью данной работы являлось изучение процессов отстаивания при различных условиях образования и разрушения водонефтяных эмульсий.

Экспериментально исследовано влияние начальной обводненности и режима перемешивания при приготовлении водонефтяных эмульсий на дисперсность капель воды в образцах эмульсий, приготовленных на основе четырех нефтей, различающихся по физико-химическим свойствам. Методика исследований описана в работе [1].

Выявлено, что при увеличении плотности нефтяной основы (образца нефти) в приготовленных водонефтяных эмульсиях возрастает количество мелких глобул воды, а размеры крупных – уменьшаются. (см. Рисунок 1).



Рисунок 1 – Фотографии срезов водонефтяных эмульсий с начальной обводненностью 20 % об., приготовленных при режиме перемешивания 2000 об/мин:

а - образец 1 ($\rho = 783,7 \text{ кг/м}^3$); б - образец 2 ($\rho = 842,4 \text{ кг/м}^3$);

в - образец 3 ($\rho = 874,8 \text{ кг/м}^3$); г - образец 4 ($\rho = 887,5 \text{ кг/м}^3$)

Опыты по исследованию зависимости размера капель от интенсивности перемешивания проводились при режимах перемешивания мешалки 1000 об/мин и 2000 об/мин. При увеличении интенсивности перемешивания увеличивается дисперсность водонефтяных эмульсий, особенно это выражено для образцов 1 и 3 с начальной обводненностью – 10% об.

Исследовалась динамика процесса отстаивания водонефтяных эмульсий при температурах 20 °С и 50 °С. Показано, что для эмульсий, приготовленных при режиме перемешивания 1000 об/мин, характерно ранжирование кривых динамики отстаивания по плотности нефти с увеличением температуры процесса. Для эмульсий с 20% начальной обводненностью, приготовленных при режиме перемешивания 2000 об/мин, повышение температуры приводит к снижению различия в динамике отстаивания эмульсий с различными по плотности нефтями. Повышение температуры приводит к увеличению размеров капель воды и более эффективному разделению эмульсии.

При исследовании динамики процесса отстаивания водонефтяных эмульсий было выявлено, что при всех рассмотренных условиях приготовления водонефтяных эмульсий эффективнее всего процесс отстаивания происходит у эмульсии, приготовленной на основе нефти образца 4, имеющей наименьшую плотность.

1. Kuzmenko E.A., Usheva N.V., Moyzes O.E., Polyakova K.A. Dynamics of water separation in destruction of water-in-oil emulsions // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. — 2016. — Vol. 43: Problems of Geology and Subsurface Development. — [012059, 5 p.].

DOI: 10.17223/9785946218412/498

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПАРАФИНОВ И ИНДИВИДУАЛЬНЫХ n-АЛКАНОВ В НЕФТИ ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ¹Курьяков В.Н., ¹Муратов А.Р., ²Иванова Д.Д.,¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем нефти и газа РАН, Москва, Россия²Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия
tntyurina455@mail.ru, pochta@muctr.ru

В докладе приводятся результаты исследований смеси индивидуального парафина $C_{23}H_{48}$ (трикозан) с Мордово-Кармальским битумом. Исследована смесь с различной концентрацией указанных компонент. Образцы для исследований представляют собой эмульсию данной смеси в воде, приготовленную методом ультразвукового диспергирования без использования поверхностно-активных веществ. Методом динамического и статического рассеяния света в исследуемых эмульсиях определены концентрационные зависимости температур фазовых переходов парафина $C_{23}H_{48}$ (плавление, кристаллизация, ротаторные фазы). При концентрациях парафина $C_{23}H_{48}$ менее 50 весовых процента в смеси при нагреве наблюдается один фазовый переход, соответствующий плавлению. Для более высоких концентраций парафина при нагреве наблюдается два фазовых перехода, как в чистом n-трикозане, соответствующие низкотемпературному переходу кристалл-ротаторная фаза и высокотемпературному – плавление (ротаторная фаза-жидкость). Авторами предложена новая методика определения температур фазовых переходов парафинов основанная на анализе температурных зависимостей интенсивности рассеянного света [1-3]. Предлагаемый метод может быть использован, как для изучения фазовых переходов различных парафинов, так и для определения важных технических параметров таких систем, как *Phase Change Materials (PCM)* – систем изменяющих свое фазовое состояние, используемых для эффективного хранения и переноса тепловой энергии. В таких системах эффективность переноса тепловой энергии жидкостью увеличивается благодаря скрытой теплоте фазовых переходов частиц, образующих дисперсную фазу. Одна из перспективных областей применения парафиновых эмульсий – теплоноситель повышенной эффективности (*PCM*).

Исследования методом динамического и статического рассеяния света были выполнены на оборудовании Photocor Compact-Z (Россия).

1. Kuryakov V.N., De Sanctis Lucentini P.G., Ivanova D.D. Tricosane ($C_{23}H_{48}$) and Octacosane ($C_{28}H_{58}$) mixture phase transition insight via Light scattering techniques // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 347 012034. -2018, <https://doi.org/10.1088/1757-899X/347/1/012034>.
2. Kuryakov V.N., Ivanova D.D. Determination of melting point of n-alkanes by means of light scattering technique // Journal of Physics: Conference Series (JPCS). 2019 (принята в печать)
3. Kuryakov V.N., Ivanova D.D. Crystallization behavior of pure n-alkane (n-nonadecane) in a form of nanoemulsion // International Journal of Nanoscience, 2019 (принята в печать)

DOI: 10.17223/9785946218412/499

ВЛИЯНИЕ ОБРАБОТКИ КИСЛОТНОЙ КОМПОЗИЦИЕЙ ГБК НАГНЕТАТЕЛЬНОЙ СКВАЖИНЫ УСИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ НА ДОБЫЧУ НЕФТИ И СВОЙСТВА ДОБЫВАЕМЫХ ФЛЮИДОВ

Овсянникова В.С., Рождественский Е.А., Стрелец Л.А., Кувишинов И.В., Алтунина Л.К.
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук (ИХН СО РАН), Томск, Россия
varja@ipc.tsc.ru

В данной работе исследовано влияние обработки нагнетательной скважины кислотной композицией на дебит и состав нефти и воды в 20 реагирующих добывающих скважинах пермокарбоновой залежи Усинского месторождения.

Композиция ГБК пролонгированного действия на основе аддукта неорганической кислоты и многоатомного спирта и содержащая поверхностно-активное вещество, будучи вначале кислотной породорастворяющей, после взаимодействия с породой становится нейтральной или щелочной нефтевытесняющей композицией.

Через 18-19 месяцев суммарная добыча достигла 43 тыс. тонн за счет совместного действия кислотной обработки, а также противифльтрационного эффекта гелеобразующей композиции и повышения дебета нефтевытесняющей композицией, обработка которыми прошла за 6 месяцев до кислотной.

Таблица - Физико-химические характеристики пластовой воды и нефти через 4 и 14 месяцев после обработки кислотной композицией ГБК

№ скв.	Дата отбора	Флюид	Минерализация воды, г/дм ³	рН	Вязкость нефти, Па·с			Λ = max/min
					Виброскан	Реостресс		
						max	min	
31	25.04.18	н	-	-	6,021	5,105	4,205	1,2
	13.03.19	н	-	-	8,063	5,304	3,948	1,3
429	25.04.18	н	-	-	4,776	4,159	3,803	1,1
	13.03.19	н	-	-	8,258	4,676	3,985	1,1
3264	25.04.18	в+н	-	7,0	5,036	7,595	6,159	1,2
	13.03.19	н	-	-	7,255	6,159	4,289	1,4
3265	25.04.18	в+н	114,1	7,4	6,892	7,031	5,398	1,3
	13.03.19	в+н	115,7	7,1	9,441	5,398	4,473	1,2
3320	25.04.18	н	-	-	6,214	5,218	4,451	1,2
	13.03.19	н	-	-	6,891	6,399	3,662	1,7
3324	25.04.18	в+н	-	7,5	4,488	7,443	5,133	1,5
	13.03.19	н	-	-	7,216	8,572	2,104	4,1
4589	25.04.18	в+н	72,5	6,9	5,122	6,899	5,680	1,2
	13.03.19	в+н	79,8	7,1	6,545	7,453	4,055	1,8
6319	25.04.18	н	-	-	6,124	7,300	4,964	1,5
	13.03.19	в+н	-	6,5	4,796	6,455	0,798	8,1

О присутствии композиции в добываемой продукции свидетельствовал карбамид: после обработки в концентрации 700 и 900 мг/дм³, а через год – в концентрации 0.03-0.13 мг/дм³ и ион аммония через год после закачки.

Об изменении фильтрационных потоков или поступлении флюидов из ранее неохваченных участков свидетельствовали изменение минерализации и катионно-анионного состава воды и вязкости нефти, например, в скважинах №№ 7 ОЦ, 431, 3265, 3324 и 4589. А изменение характера течения нефти в скважине № 6319, возможно, явилось следствием изменения состава за счет десорбции полярных компонентов нефти при растворении породы.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта НИР V.46.2.3, выполняемого в соответствии с Программой фундаментальных научных исследований (ФНИ) на 2013-2020 гг.

DOI: 10.17223/9785946218412/500

УТОЧНЕНИЕ СВОЙСТВ ПСЕВДОКОМПОНЕНТА ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ, ИМИТИРУЮЩЕГО ВОДУ В ПЛАСТОВЫХ УСЛОВИЯХ.

Токмакова П.Г.

Публичное акционерное общество «Сургутнефтегаз»,
Сургутский научно-исследовательский и проектный институт «СургутНИПИнефть»
Тюменское отделение, Тюмень, Россия
tonipi-ext@surgutneftgas.ru

Для построения или актуализации модели течения флюидов в пласте, необходима совокупность лабораторных и промысловых данных. Сложная смесь фильтрующихся в пласте веществ моделируется тремя псевдокомпонентами, и для определения их свойств в пластовых условиях вводится понятие аддитивных объемов:

$$V_{\text{пн}} = V_{\text{н}}^{P,T} + V_{\text{г}}^{P,T} + V_{\text{в}}^{P,T} \quad (1)$$

где: $V_{\text{пн}}$ – объем нефтегазовой смеси при пластовых значениях температуры и давления; $V_{\text{н}}^{P,T}$, $V_{\text{г}}^{P,T}$, $V_{\text{в}}^{P,T}$ – объемы тяжёлого (нефтяного), легкого (газового) псевдокомпонента и псевдокомпонента, имитирующего воду в пластовых условиях, соответственно.

В практике подготовки характеристик псевдокомпонентов для построения модели свойства пластовой воды, численные значения плотности пластовой нефти и выделившегося в стандартных условиях нефтяного газа принимаются по результатам обоснования этих параметров в подсчете запасов. При этом, для упрощения расчетной модели солевой состав воды и переменная минерализация не берутся во внимание. Это оправдано для пресных вод или с низкой соленостью, но, когда минерализация превышает 200 г/л, использование информации об общей минерализации и солевом составе рассолов (преобладающих солей) является необходимым в силу специфики концентрационных девиаций, влияющих на постоянные свойства (плотность и вязкость флюида в пласте), а также на объемный коэффициент, коэффициент сжимаемости и пьезо-коэффициент вязкости.

В ТО «СургутНИПИнефть» были проведены экспериментальные исследования по изучению свойств рассолов заданных концентраций, где в качестве обучаемой модели был взят однокомпонентный раствор соли, преобладающей в составе пластовой воды месторождений Восточной Сибири. По результатам исследований для смесей различного соотношения закачиваемой и пластовой воды были построены зависимости свойств (давления и температуры) от минерализации. [1-2]

Выявлено, что свойства одинаково концентрированных растворов не зависят от давления и температуры, соответственно справедливо следующее соотношение:

$$\frac{\rho_{\text{пл.воды}}(M,P,T)}{\rho_{\text{р-р соли}}(M,P,T)} \cong \frac{\rho_{\text{пл.воды}}(M,P=0,1 \text{ МПа},T=20 \text{ }^\circ\text{C})}{\rho_{\text{р-р соли}}(M,P=0,1 \text{ МПа},T=20 \text{ }^\circ\text{C})}. \quad (2)$$

Данный вывод позволяет использовать свойства флюида, изученного при стандартных условиях, что, несомненно, удобнее и оперативнее в силу неизбежных трудностей с отбором пластовых проб и, следовательно, их недостаточным количеством. По построенным характеристическим номограммам с высокой степенью достоверности (свыше 90%) возможно рассчитать плотность и вязкость пластовой воды с переменной минерализацией, в заданных условиях. При этом расчет коррелирует с экспериментом в пределах инструментальной погрешности, которая не превышает 10%.

1. Adams, J. J. Equations of state for basin geofluids algorithm review and inter-comparison for brines / J. J. Adams, S. Bachu // Geofluids, 2002. – №2, P. 257-271.
2. McCain, W. D. Petroleum reservoir fluid property correlations / W. D. McCain, J. P. Spivey, C. P. Lenn. // Tulsa. PennWell Corporation, 2011. – P. 219.

Секция В. Новые нетрадиционные технологии подготовки, транспорта и переработки нефти и газа. Экологические аспекты добычи, подготовки и транспорта нефти и газа: проблемы и решения.

DOI: 10.17223/9785946218412/501

**ПРЕДОТВРАЩЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ
СМЕШАННЫМИ ИНГИБИТОРАМИ СПИРТ–СОЛЬ**

¹Мендгазиев Р.И., ¹Семенов А.П., ^{1,2,3}Стопорев А.С., ¹Винокуров В.А.

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина», Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

³Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет», Новосибирск, Россия
meda810@mail.ru, stopor89@bk.ru

Газовые гидраты представляют собой соединения включения, которые образуются при взаимодействии небольших молекул газов или легколетучих органических жидкостей (гостей) с молекулами воды [1]. Предупреждение образования газогидратов и регулирование скорости их роста является важной задачей для нефте- и газодобывающей промышленности. Изучение образования гидратов в многокомпонентных системах, близких по составу к реальным, является основой для разработки эффективных методов контроля гидратов.

В данной работе изучалось образование и разложение газовых гидратов модельных газов и газовых смесей в реакторе с перемешиванием. Исследованы процессы образования и разложения гидратной фазы, определены условия трехфазного равновесия водный раствор – газ – гидрат. Составы модельных рассолов, использованных в работе, были как близкие к пластовым водам (сеноманская вода), так и с добавкой других перспективных компонентов, выступающих в роли термодинамических ингибиторов гидратообразования ($MgCl_2$). Несмотря на то, что используемый автоклав ГНА 350 позволяет интенсивно перемешивать среду (600 об/мин), в некоторых случаях в систему добавлялось неионогенное поверхностно-активное вещество для предотвращения агломерации гидратных частиц и, как следствие, более быстрого достижения равновесного состояния в системе при определении равновесных условий разложения гидрата. В ходе проведения экспериментов было выявлено, что в зависимости от состава среды и газа может проявляться несколько стадий роста гидрата, сопровождающихся экзотермическими эффектами. В некоторых случаях процесс роста протекал более интенсивно: повышение температуры в автоклаве на $8,0\text{ }^\circ\text{C}$ сопровождалось резким падением давления. Эти данные говорят о резком увеличении доли гидрата в системе, что может приводить к закупориванию трубопровода и остановке добычи. При этом было обнаружено, что добавка хлорида магния (в смеси со стандартным антигидратным реагентом – метанолом) более эффективно ингибирует образование гидрата по сравнению с системами с чистым метанолом. Проявление данного синергетического эффекта может позволить снизить потребление метанола (контаминант) и вовлечь в процесс добычи нефти и газа такой «зелёный» реагент как хлорид магния, широко распространенный в природе в виде минерала бишофита.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации (проект МК-6886.2018.3).

1. Sloan E. D., Koh C. A. Clathrate Hydrates of Natural Gases. – CRC Press (Taylor and Francis Group): Boca Raton, 2008. – 752 p.

DOI: 10.17223/9785946218412/502

**СОСТАВ ПРОДУКТОВ КРЕКИНГА НЕФТЯНЫХ МАЛЬТЕНОВ
В ПРИСУТСТВИИ БУТИЛБРОМИДА**

Певнева Г.С., Воронецкая Н.Г., Свириденко Н.Н., Головки А.К.

*Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
pevneva@ipc.tsc.ru*

Поиск путей конверсии высокомолекулярных соединений нефти, отличных от традиционной гидрообработки, требует исследования реакций крекинга как без, так и в присутствии добавок, различающихся по своему воздействию. В работах [1-3] показано, что при химической модификации, в частности галогенировании, происходит облагораживание тяжелой нефти с увеличением выхода светлых продуктов, но при этом также происходит формирование кокса и частичная деметаллизация сырья. В связи с чем, проведено исследование,

целью которого является изучение влияния бутилбромид (C_4H_9Br) на направленность термических превращений мальтенов. Содержание смол в мальтенах составляет 19,6 % мас.

В процессе крекинга мальтенов в присутствии C_4H_9Br образуется значительно большее количество твердых продуктов (2,3 % мас.), чем при крекинге без добавки (0,3 % мас.). Выходы газообразных продуктов сопоставимы. В жидких продуктах крекинга как в присутствии C_4H_9Br , так и без добавки образуются асфальтены – их содержание составляет 2,6 и 1,1 %, соответственно. Крекинг мальтенов без добавки сопровождается образованием дополнительного количества смол, которое достигает 25 % против 19,6 % в исходных мальтенах. Проведение крекинга с C_4H_9Br приводит к снижению содержания смол до 10,0 %, что позволяет предположить иницирование бутилбромидом реакций деструкции смол в этом процессе. Помимо глубокой деструкции смол в присутствии C_4H_9Br преобразованию подвергаются и масла (УВ) за счет реакций деалкилирования и дегидрирования. В этих продуктах значительно увеличивается содержание низкомолекулярных n-алканов C_{11} - C_{19} . Значение отношения суммарного содержания низкомолекулярных n-алканов C_{11} - C_{19} (нм) к содержанию высокомолекулярных C_{20} - C_{31} гомологов (вм) нм/вм равно 2,8, а в термолизате без добавки – нм/вм = 0,97. В продуктах крекинга с добавкой C_4H_9Br отсутствуют алкены, тетра- и пентациклические насыщенные УВ. В отличие от состава алкилбензолов (АБ) исходных мальтенов и термолизата без добавки, в которых содержатся преимущественно триметилАБ C_{13} - C_{21} с алкильным заместителем изопреноидного строения, в продуктах крекинга с добавкой C_4H_9Br АБ представлены низкомолекулярными тетраметилбензолами C_8 - C_{10} . Это свидетельствует о деструкции триметилАБ, протекающей, главным образом, по β -связи С-С в алифатическом заместителе, и приводящей к образованию насыщенных УВ и метилбензолов. Содержание алкилнафталинов (АН) в продуктах крекинга без и в присутствии C_4H_9Br увеличивается с 13,5 до 24,3 % отн. Вероятно, образование дополнительных количеств АН происходит в результате деструкции смол или за счет рекомбинации радикалов, образующихся при деструкции алифатических заместителей АБ. В составе АН продуктов крекинга с C_4H_9Br увеличивается содержание голоядерного нафталина (с 0,3 до 3,0 % отн.) и метилнафталинов (с 0,9 до 4,0 % отн.) по сравнению с термолизатом без добавки, что может свидетельствовать о деметилировании полиметилнафталинов. Вовлечение алкилфенантронов в формирование кокса и асфальтенов приводит к снижению их количества в продуктах крекинга с C_4H_9Br по сравнению с крекингом без добавки с 11,4 до 9,9 % отн.

Увеличение глубины деструкции смол и протекание реакций деалкилирования и дегидрирования УВ при крекинге мальтенов в присутствии C_4H_9Br сказывается на изменении фракционного состава продуктов крекинга. Выход светлых фракций по сравнению с крекингом без добавок достигает 61,5 % (НК-200 °С – 17,5 %; 200-360 °С – 44,0 %). Выход остатка, выкипающего выше 360 °С, снижается ~ в 2 раза.

1. Prado Glauca H.C. and Arno de Klerk // Energy Fuels. - 2014. -Vol. 28. -P. 4458.
2. X. Men, B. Shi, Daoyong Yu, G. Que // Huaxue Fanying Gongcheng Yu Gongyi/Chemical Reaction Engineering and Technology. -2010. -V. 26.- №2. -P. 136.
3. Glauca H.C. Prado, Riya, Michael Hyrve, Arno de Klerk // Fuel. -2018. -V. 211. -P. 775.

DOI: 10.17223/9785946218412/503

КАТАЛИЗАТОРЫ ГИДРОДЕСУЛЬФИРОВАНИЯ, ПРИГОТОВЛЕННЫЕ МЕХАНОАКТИВАЦИЕЙ МОЛИБДЕНИТА В КРИОГЕННЫХ УСЛОВИЯХ¹Микубаева Е.В., ²Уймин М.А., ²Майков В.В., ³Журавков С.П.,¹Восмериков А.В., ¹Федушак Т.А.¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*²*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия*³*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Томск, Россия
canc@ipc.tsc.ru, physics@imp.uran.ru, rector@tsu.ru*

В области гидроочистки нефтепродуктов становятся востребованными катализаторы, процедуры приготовления которых отвечают требованиям «зеленой химии». Значительный интерес вызывает прямой способ приготовления катализатора гидродесульфирования путем механического измельчения молибдендисульфида в среде различных органических растворителей [1], или в присутствии их микродобавок [2].

Приведены данные по приготовлению сульфидных массивных крио-катализаторов в одну стадию посредством механического измельчения молибденита (MoS_2) в криогенных условиях (80 К) в среде жидкого аргона, а также результаты исследования их свойств и активности в модельной реакции гидродесульфирования дибензотиофена (ДБТ) и гидрогенолиза компонентов дизельной фракции (ДФ).

Физико-химические характеристики крио-образцов изучены методами рентгенофазового анализа (РФА), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), седиментационного анализа (СА), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), ИК спектроскопии. Их активность оценивали в соответствии с содержанием остаточной серы ($\text{S}_{\text{ост}}$) в гидрогенизатах ДБТ и по составу образующихся продуктов (данные хромато-масс-спектрометрии).

Было показано, что гидродесульфлирующая способность крио-катализаторов в модельной реакции и в процессе гидрогенолиза компонентов ДФ достаточно высока и составляет $\text{S}_{\text{ост}} = 4 \text{ ppm}$ и 15 ppm соответственно ($\text{S}_{\text{исх}} = 500 \text{ ppm}$). Важно, что в отличие от ранее описанных [2] массивных каталитических систем, крио-образцы не нуждаются в предварительном активировании сероводородом и проявляют повышенную устойчивость к химической деградации при хранении. Их нанокристаллиты обладают более высокой дисперсностью (РФА, СА), и в то же время, характеризуются более низким уровнем дефектности. На поверхности крио-порошков в четырехкратно меньшем количестве присутствуют S–O-структуры (РФЭС), способные образовывать при контакте с водой сульфат-анионы и, соответственно, серную кислоту.

Обсуждаются причины специфичности крио-катализаторов и возможный механизм процессов гидродесульфирования в их присутствии.

1. Masato K., Kunio U., Yasunori K., Fumikazu I. Micro-crystalline molybdenum sulfide prepared by mechanical milling as an unsupported model catalyst for the hydrodesulfurization of diesel fuel // *Applied Catalysis A: General.* – 2004. – V.276. – P. 241–249.
2. Feduschak T., Akimov A., Morozov M., Uymin M., Zaikovskii V., Prosvirin I., Vosmerikov A., Zhuravkov S., Vlasov V., Kogan V. Synthesis and characterization of mechanically activated bulky molybdenum sulphide catalysts // *Comptes Rendus Chimie.* – 2016. – V. 19. – P. 1315-1325.

DOI: 10.17223/9785946218412/504

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРООЧИСТКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА

Баклашкина К.А.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
tri@tri.ru*

Серосодержащие соединения – это группа соединений, содержание которой строго нормируется из-за оказываемого ей негативного воздействия на окружающую среду, работу ДВГ и качество топлива. Основным процессом, снижающим содержание серы в топливе, является гидроочистка. Данный процесс способствует удалению полициклоароматических аренов, которые влияют на работу ДВС, изменяя приемистость и дымность [1], и соединений азота, которые являются каталитическими нейтрализаторами.

Производство дизельного топлива в соответствии с требованиями европейских экологических стандартов на НПЗ РФ возможно только после модернизации действующих установок гидроочистки. Поэтому глобальной задачей стоит разработка инновационных способов получения малосернистого топлива, либо усовершенствование действующих установок гидроочистки. Конверсия соединений серы происходит в таких процессах, как окислительное обессеривание (ОО), экстракция, озонирование и др. Перспективным методом обессеривания является процесс окислительного обессеривания [2]. Наибольшей популярностью в качестве окислительного агента пользуется пероксид водорода, так как он является дешевым, не загрязняющим окружающую среду и коммерчески доступным. Данный процесс протекает при атмосферном давлении и температуре до 80 °С, с высокой конверсией ароматических соединений и без использования водорода.

Цель данной работы - усовершенствовать процесс ГО путем введения дополнительного блока обессеривания, представленного процессом ОО.

В качестве образцов для исследования были выбраны 3 прямогонных дизельных фракции и образец вакуумного газойля с разным содержанием серы. Содержание серы определялось с помощью Спектроскан-S, а содержание азота с помощью элементного анализатора Vario EL Cube. Групповой углеводородный состав дизельных фракций определялся с помощью колоночной хроматографией, групповой состав сернистых групп дизельной фракции ГЖХ (детектор ПФД). Далее образцы подвергались процессу окислительного обессеривания, гидроочистке на лабораторной каталитической установке, и окислительному обессериванию с последующим процессом гидроочистки. Для полученных образцов проводились исследования аналогичные исследованиям для исходных образцов.

Выводы. Процесс окислительного обессеривания является инновационным способом для предварительного снижения содержания серы, азота и полиароматических углеводородов перед гидроочисткой. Процесс окислительного обессеривания позволит снизить сумму налоговых выплат и повысить уровень экологичности НПЗ России. Степень конверсии серы достигает 92 % мас., азота -59 % мас. Определены оптимальные параметры проведения процесса: время контакта- 30 минут, температура - 70 °С, соотношение S: H₂O₂=5:8, H₂O₂:HCOOH=5:7, за счет чего происходит сокращение используемых единиц оборудования, электроэнергии. Составлена технологическая схема блока окислительного обессеривания и рассчитан материальный баланс. В связи с тем, что процесс не реализован в промышленности, были рассчитаны показатели экономической эффективности, такие как индекс прибыльности и интегральный экономический эффект, которые равны 1,79 и 308,49 млн долл. США, соответственно. Срок окупаемости менее одного года.

1. Ганжа В.Л. Основы эффективного использования энергоресурсов: теория и практика/ В. Л. Ганжа. – Минск: Белорусская наука, 2007. – 450 с.
2. Pawelec B. Toward near zero-sulfur liquid fuels: a perspective review // Catalysis Science & Technology. – 2011. – № 1. – P. 23 – 42.

DOI: 10.17223/9785946218412/505

ВЛИЯНИЕ СПОСОБА ВВЕДЕНИЯ РЕНИЯ В ЦЕОЛИТ НА ДИНАМИКУ ЕГО ДЕЗАКТИВАЦИИ ПРИ ОБЛАГОРАЖИВАНИИ ПРЯМОГОННОГО БЕНЗИНА

Величкина Л.М., Восмеригов А.В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*

mps@ipc.tsc.ru

В процессе облагораживания прямогонных бензиновых фракций нефти обычно используются бифункциональные металлсодержащие катализаторы на основе высококремнеземного цеолита типа ZSM-5. В качестве модифицирующих агентов применяются переходные металлы с не полностью занятой d-оболочкой, в частности, рений. В работе [1] нами было показано, что ренийсодержащие цеолитные катализаторы увеличивают выход жидких продуктов – высокооктановых бензинов, с требуемым октановым числом и низким содержанием ароматических углеводородов. Уменьшение количества аренов в получаемых катализатах, кроме улучшения экологических показателей бензинов, должно способствовать увеличению времени стабильной работы катализатора.

Целью настоящей работы было изучение влияния способа введения рения в высококремнеземный цеолит типа пентасил на его каталитическую активность и стабильность в процессе облагораживания прямогонной бензиновой фракции нефти.

На основе цеолита с силикатным модулем 40 получены ренийсодержащие образцы, в которых концентрация рения составляла 0,5% масс. Модифицированные цеолитные катализаторы были приготовлены методами ионного обмена (ИО), пропитки (ПР), сухого смешения с солью (СС) и ультрадисперсным порошком (УДП) рения. Особенности полученных каждым из этих методов катализаторов описаны нами в работах [1, 2].

Динамика снижения каталитической активности немодифицированного ZSM-5 и ренийсодержащих цеолитных образцов изучена в процессе превращения прямогонной бензиновой фракции нефти в течение 30 часов их работы при атмосферном давлении, температуре 380°C и объемной скорости подачи сырья 2 ч⁻¹. Продукты реакции анализировались методом газовой хроматографии. За показатель каталитической активности было выбрано содержание ароматических углеводородов в получаемых бензинах.

Установлено, что наибольшей ароматизирующей активностью в течение 1 часа работы обладает образец, модифицированный УДП Re. Содержание образующихся на нем аренов составляет 34% масс. Для исходного ZSM-5 и катализаторов, полученных методами СС, ИО и ПР, концентрация ароматических углеводородов составила: 28, 26, 25 и 22% масс. соответственно. После 15 часов работы максимальное количество аренов (22%) содержалось в катализате, полученном на образце с УДП, а далее по убыванию: СС (21%), ИО (18%), ПР (17%), исходный ZSM-5 (13%). После 30 часов реакции ароматизирующая активность образцов еще снизилась, а характер их распределения практически не изменился: УДП (19%) > СС (18%) > ПР (14%) > ИО (13%) > ZSM-5 (11%). Таким образом, в ходе процесса превращения прямогонного бензина каталитическая активность ренийсодержащих цеолитов снизилась в 1,4-1,9 раза, а немодифицированного цеолита – в 2,6 раза.

Работа выполнена в рамках проекта № V.46.2.1 Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук.

1. Величкина Л.М., Восмеригов А.В. Облагораживание прямогонной бензиновой фракции нефти на ренийсодержащих цеолитах типа ZSM-5 // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2017. – № 5. – С. 7-13.
2. Velichkina L.M., Vosmerikov A.V. Dry Mixing Method as an Effective Method of Modification of Zeolite Catalysts // Proceedings of the International Conference on the Advanced Materials with Hierarchical Structure for New Technologies and Reliable Structures, Tomsk, October 1-5, 2018. – AIP Conference Proceeding. – V. 2051. – P. 020317. – <https://doi.org/10.1063/1.5083560>

DOI: 10.17223/9785946218412/506

ЗАВИСИМОСТЬ ДУОСОЛ-ПРОЦЕССА ОТ КАЧЕСТВЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОНЕНТОВ «СЕЛЕКТО»

¹Валетова Н.Б., ¹Семенычева Л.Л., ¹Занозина В.Ф., ¹Фаерман В.И.,
²Фомин О.А., ³Носова Ю.Е., ²Акимов А.В.

¹*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

²*ООО «ЛУКОЙЛ-Волгограднефтепереработка», Волгоград, Россия*

³*ООО «ЛУКОЙЛ-Нижегороднинефтепроект», Нижний Новгород, Россия
nata-bor-2005@mail.ru, refinery@vnpz.lukoil.ru, Yuliya.Nosova@lukoil.com*

В промышленности известен Дуосол-процесс - очистка парными растворителями, не смешивающимися, различающимися по своим физико-химическим свойствам и характеру. В Дуосол-процессе одним из растворителей является пропан, обладающий деасфальтирующими свойствами и растворяющий желательные компоненты сырья, а другим растворителем - смесь фенола и крезола («селекто»), растворяющая нежелательные компоненты [1]. Следует отметить, что при очистке гудронов с помощью «селекто» образуется так называемое «легкое масло», которое содержит небольшие количества фенола и крезола и их извлечение из фракции легкого масла является целесообразным с целью дальнейшей очистки следующих партий гудронов.

Целью данной работы является анализ качественных характеристик жидких компонентов растворителя «селекто», используемого в процессе Дуосол, моделирование на их основе процесса образования эмульсии с целью выявления взаимосвязи качества исходных реагентов и состава фракций после разделения эмульсии, а также разработка условий максимального разделения этих фракций.

Главными задачами стали идентификация и количественное определение компонентов исходных растворителей, их смесей («селекто») с помощью хромато-масс-спектрометрического метода, и подбор компонентов для полного разделения исходных растворителей после контакта с «легким маслом».

Анализ компонентов, входящих в состав растворителя «селекто», показал, что фенол содержит более 99% основного вещества с примесями незначительных количеств крезола и диметилфенола; крезол технический содержит: крезола – 47%, диметилфенола - более 50%, а также незначительные количества этилкресола и триметилфенола; крезол «ХЧ» содержит только мета - крезол. Формирование искусственных эмульсий на основе «селекто» с легким маслом и водой, которые спонтанно образуются в процессе Дуосол, показало, что расслоение на три слоя: верхний – «легкое масло», средний – водный раствор, нижний – органический слой происходит не одновременно: выделение масляной фракции - за несколько минут, более тяжелых фракций занимает несколько часов. Качество разделения слоев более четкое с эмульсией, содержащей крезол «ХЧ». Анализ состава и качества фракций при разделении эмульсии показало, что при использовании «селекто» с крезолом «ХЧ» наблюдается переход его компонентов в водную и масляную фракцию значительно в меньшей степени, чем для «селекто» с крезолом техническим. Это свидетельствует о том, что использование крезола «ХЧ» в качестве компонента селекто более целесообразно. Специальные эксперименты с «селекто» (кресол технический) показали, что органические растворители, такие как диметилсульфоксид и пропиленкарбонат позволяют экстрагировать компоненты «селекто» из масляной фракции, а введение в воду хлористого натрия (до 4,5%) способствует удалению воды из фенол-кресольной фракции.

1. Камьянов В.Ф., Аксенов В.С., Титов В.И. Гетероатомные компоненты нефтей. - Новосибирск: Наука, 1983. - 238 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/507

КРЕКИНГ МАЛЬТЕНОВ С ДОБАВКОЙ WC/Ni-Cr

Воронецкая Н.Г., Певнева Г.С., Свириденко Н.Н., Головки А.К.
Институт химии нефти Сибирского отделения РАН, Томск, Россия
voronetskaya@ipc.tsc.ru

Поиск путей конверсии высокомолекулярных соединений нефти, отличных от традиционной гидрообработки, требует исследования реакций крекинга как без, так и в присутствии добавок, различающихся по своему воздействию. С этой целью изучено влияние каталитической добавки (порошок WC/Ni-Cr с размерами частиц 10^{-6} м) на увеличение глубины деструкции смолистых компонентов тяжелой нафтенной нефти Усинского месторождения. Крекинг мальтенов (деасфальтизированной нефти) проводили в автоклаве объемом 12 см³ при температуре 450 °С и продолжительности 120 минут. Крекинг мальтенов в присутствии WC/Ni-Cr приводит к увеличению выхода твердых и газообразных продуктов до 1,1 % и 4,8 %, при этом снижается выход жидких продуктов. Но, несмотря на это, введение WC/Ni-Cr способствует улучшению качественного состава жидких продуктов. Так, в этих продуктах существенно снижается содержание смол не только по сравнению с продуктами крекинга без добавки, но и по сравнению с их содержанием в исходных мальтенах. Кроме того, суммарный выход дистиллятных фракций НК-360 °С достигает 52,7 % против 34,6 % при крекинге без добавки. На крекирующие свойства добавки указывает тот факт, что содержание H₂ и углеводородных газов C₁-C₂ в продуктах крекинга с добавкой WC/Ni-Cr значительно выше, чем без нее.

С введением добавки WC/Ni-Cr содержание n-алканов в термолизате увеличивается 22,5 до 36,7 % отн. Крекинг в присутствии WC/Ni-Cr приводит к увеличению содержания низкомолекулярных n-алканов C₁₁-C₁₉ по сравнению с их содержанием в термолизате без добавки. Соотношение нм/вм равно 1,78 и 0,97 соответственно. В продуктах крекинга без добавки среди алкенов идентифицированы четные гомологи C₁₆-C₂₈. Отличительной особенностью продуктов крекинга с WC/Ni-Cr является отсутствие в их составе алкенов и циклических насыщенных УВ (хейлантанов, стеранов, гопанов). Алкилбензолы в исходных мальтенах и термолизате без добавки представлены преимущественно гомологической серией триметилалкилбензолов C₁₃-C₂₁ с заместителем изопреноидного строения (m/z 133). В продуктах крекинга с добавкой WC/Ni-Cr идентифицированы только низкомолекулярные метилбензолы состава C₈-C₁₀, что свидетельствует о деструкции триметилалкилбензолов C₁₃-C₂₁, протекающей, главным образом, по β-связи C-C в алифатическом заместителе, и приводящей к образованию насыщенных углеводородов и метилированных бензолов. Суммарное содержание алкилнафталинов в продуктах крекинга в присутствии WC/Ni-Cr увеличивается с 13,6 до 20,8 % отн., что, вероятно, обусловлено деструкцией смол. Вовлечение алкилфенантронов и ПАУ в формирование кокса и асфальтенов приводит к снижению их количества в продуктах крекинга с WC/Ni-Cr по сравнению с крекингом без добавки. Среди сернистых соединений в продуктах крекинга с WC/Ni-Cr наблюдается снижение количества дибензотиофенов с 8,5 до 5,4 %, но увеличивается содержание бензотиофенов с 3,7 до 6,7 % по сравнению с крекингом без добавки. Вероятно, дибензотиофены вовлекаются в формирование асфальтенов или концентрируются в коксе, а бензотиофены, являясь фрагментами смол, при глубокой конверсии попадают в масла.

Таким образом, использование каталитической добавки WC/Ni-Cr при крекинге мальтенов, несмотря на увеличение выхода побочных продуктов, способствует улучшению качественного состава жидких продуктов: снижается содержание смол, повышается выход дистиллятных фракций.

DOI: 10.17223/9785946218412/508

**АНАЛИЗ МНОГОЛЕТНЕЙ ДИНАМИКИ ВЕГЕТАЦИОННОГО ИНДЕКСА
РАСТИТЕЛЬНОСТИ НА ОБЪЕКТАХ НЕФТЕГАЗОВОГО КОМПЛЕКСА С
ПРИМЕНЕНИЕМ СПУТНИКОВЫХ ДАННЫХ**

Перемитина Т.О., Ященко И.Г.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
pto@ipc.tsc.ru*

Западно-Сибирская нефтегазоносная провинция (НГП) – одна из крупнейших нефтегазоносных провинций мира. За всю историю нефтяной промышленности в России было добыто более 21 млрд т нефти, в том числе в Западно-Сибирской НГП – 11,5 млрд т, обеспечивает 54,5 % добытой нефти в стране [1]. Большая площадь Западно-Сибирской НГП относится к так называемым «труднодоступным территориям».

Труднопроходимость является серьезной проблемой в получении исходных наземных данных об экологическом состоянии окружающей среды. Перспективным и экономически оправданным подходом к оценке экологического состояния труднодоступных территорий является применение методики выявления экологических проблем с использованием данных дистанционного зондирования Земли (ДДЗ). Алгоритмы количественной оценки состояния растительности, основанные на расчете вегетационных индексов, позволяют проводить оценку динамики растительного покрова на протяжении всего вегетационного периода и делать выводы о текущем состоянии растительного покрова труднодоступных территорий Западно-Сибирской НГП [2].

Целью данной статьи является изучение динамики изменения значений вегетационного индекса EVI (Enhanced Vegetation Index) для оценки состояния растительного покрова углеводородных месторождений Томской области: Арчинское, Шингинское, Казанское, Южно-Табаганское и Западно-Останинское за вегетационные периоды с 2007 по 2017 гг. Значения индекса EVI взяты из данных системы MODIS (продукт MOD13Q), это 16-ти дневные композиты спутниковых изображений, содержащие значения вегетационных индексов. Средние значения индекса EVI рассчитаны для исследуемых территорий по спутниковым изображениям с датой съемки с 13 июля по 28 июля 2007 – 2017 гг. Следует отметить, что спутниковые данные системы MODIS находятся в свободном доступе, что позволяет быстро и своевременно оценить состояние окружающей среды [3].

Анализ динамики изменения средних значений усовершенствованного индекса EVI позволил определить минимальные и максимальные значения индекса для исследуемых территорий, а также выявить тенденции увеличения его значений за 10-летний период, что свидетельствует о процессе восстановления растительного покрова, его неугнетенном состоянии и улучшении экологической обстановки нефтедобывающих территорий. Установлена зависимость значений EVI от метеоданных (температуры и относительной влажности), но связь имеет сложный и неустойчивый характер, что требует продолжения мониторинговых исследований.

1. Конторович А.Э., Эдер Л.В. Новая парадигма стратегии развития сырьевой базы нефтедобывающей промышленности Российской Федерации // Минеральные ресурсы России. Экономика и управление. – 2015. – № 5. – С. 8-17.
2. Ященко И.Г., Перемитина Т.О. Комплексный подход к оценке влияния антропогенных и природных факторов на окружающую среду нефтегазодобывающих территорий // Оптика атмосферы и океана. – 2015. – Т. 28. – № 06. – С. 544-547.
3. Zhang M., Friedl M., Schaaf C., Strahler A., Hodges J., Gao F., Reed B., Huete A. Monitoring vegetation phenology using MODIS // Remote sensing of environment. – 2003. – V. 84. – Issue 3. – P. 471-475.

DOI: 10.17223/9785946218412/509

СТРУКТУРНО-ГРУППОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СМОЛ И АСФАЛЬТЕНОВ
ОСТАТКОВ ТЯЖЁЛЫХ НЕФТЕЙ РАЗЛИЧНОГО ТИПА

Копытов М.А., Головки А.К.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
kta@ipc.tsc.ru

Получены структурно-групповые характеристики смол и асфальтенов остатков нефти (>350 °С) метанового типа – месторождение Зуунбаян (Монголия) и остатков нефти (>350 °С) метано-нафтенового типа – Усинского месторождения (Республика Коми РФ). Данные представлены в таблице 1, использованы обозначения структурных параметров, предложенные авторами [1].

Таблица 1 – Средние структурные параметры молекул смол и асфальтенов

Параметры	Значение для остатка нефти месторождения Зуунбаян		Значение для остатка нефти месторождения Усинское	
	смолы	асфальтены	смолы	асфальтены
Средняя молекулярная масса, а.е.м.				
	850	1800	585	2280
Число атомов в средней молекуле				
C	59,65	129,45	41,57	162,28
H	80,19	178,39	49,91	189,77
N	1,12	1,53	0,64	2,08
S	0,12	0,06	0,51	2,44
O	2,12	2,72	0,66	2,14
H/C	1,34	1,38	1,20	1,17
Кольцевой состав				
K _o	7,5	17,4	11,4	31,7
K _a	3,6	11,0	2,9	17,7
K _n	3,9	6,4	8,5	14,0
Распределение атомов C, %				
f _a	25,6	36,0	29,8	45,0
f _n	29,1	20,4	63,9	38,8
f _п	45,3	43,6	6,3	16,1
Число углеродных атомов разного типа в средней молекуле				
C _a	14,2	46,6	12,4	73,1
C _n	16,2	26,4	26,6	63,0
C _п	25,2	56,5	2,7	26,2
C _α	6,2	13,8	6,3	21,9
C _γ	4,3	8,3	2,6	8,0
Среднее число блоков в молекуле				
m _a	1,6	3,2	1,5	4,9

Смолы и асфальтены полученные из нефти Зуунбаян (ОНЗ) характеризуются более высоким Ностатка Усинской нефти (ОНУ). Смолы и асфальтены ОНЗ отличаются ОНУ более высоким содержанием кислорода и наличием длинных линейных и слаборазветвленных алкильных заместителей с длиной цепочки до C₁₅ - C₁₇ (таблица 1, см. C_п). Наиболее высокое содержание нафтеновых и ароматических структур отмечается в смолисто-асфальтеновых компонентах ОНУ.

1. Камьянов В. Ф., Большаков Г. Ф. Определение структурных параметров при структурно-групповом анализе компонентов нефти // Нефтехимия. – 1984. – Т. 24. – №. 4. – С. 450-459.

DOI: 10.17223/9785946218412/510

ТЕРМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ СМОЛИСТО-АСФАЛЬТЕНОВЫХ КОМПОНЕНТОВ НЕФТЯНОГО ОСТАТКА

Копытов М.А., Головки А.К.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
kta@ipc.tsc.ru*

Получены средние структурные параметры молекул смол и асфальтенов мазута Усинской нефти и продуктов его термолиза в автоклаве при температуре 450 °С. Данные представлены в таблице 1, использованы обозначения структурных параметров, которые предложили авторы [1].

Таблица 1 – Средние структурные параметры молекул смол и асфальтенов.

Параметры	Значения для асфальтенов		Значения для смол	
	исходный мазут	продукты термолиза	исходный мазут	продукты термолиза
Средняя мол. масса, а.е.м.				
	2280	688	585	528
Число атомов в средней молекуле				
C	162,3	48,5	41,6	36,0
H	189,8	41,2	49,9	35,7
N	2,1	0,9	0,6	0,6
S	2,4	0,7	0,5	0,7
O	2,1	1,8	0,7	1,9
H/C	1,17	0,85	1,20	0,99
Кольцевой состав				
К _о	26,8	16,5	11,4	11,0
К _а	20,1	5,8	2,9	3,6
К _{нас}	6,7	10,8	8,5	7,4
Распределение атомов углерода, %				
<i>f_a</i>	51,0	49,5	29,8	42,7
<i>f_n</i>	16,4	46,2	63,9	52,7
<i>f_n</i>	32,6	4,3	6,3	4,7
Число углеродных атомов разного типа в средней молекуле				
С _а	82,8	24,0	12,4	15,4
С _н	26,5	22,4	26,6	19,0
С _п	52,9	2,1	2,6	1,7
С _α	21,9	7,7	6,3	6,7
С _γ	8,0	2,1	2,6	1,7
Число блоков в молекуле				
<i>m_a</i>	4,9	2,0	1,5	1,6

В процессе термолиза заметно снижается содержание смол с 37,0 % мас. (в исходном мазуте) до 13,9 % мас. (в продуктах крекинга), а доля асфальтенов увеличивается с 8,5 % мас. (в исходном мазуте) до 20,0 % мас. (в продуктах крекинга).

Изменение структурных параметров молекул смол отличается от изменений молекул асфальтенов. При термолизе молекулярная масса выделенных смол и число структурных блоков (*m_a*) меняется не значительно с 585 (в смолах исходного мазута) до 528 а.е.м и с 1,5 до 1,6 соответственно, что говорит об их более высокой термической устойчивости.

1. Камьянов В. Ф., Большаков Г. Ф. Определение структурных параметров при структурно-групповом анализе компонентов нефти //Нефтехимия. – 1984. – Т. 24. – №. 4. – С. 450-459.

DOI: 10.17223/9785946218412/511

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ЦИНКА НА СЕЛЕКТИВНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ АРЕНОВ ИЗ ПРОПАН-БУТАНОВОЙ ФРАКЦИИ НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЦЕОЛИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ, АКТИВИРОВАННЫХ ПЛАЗМОЙ

¹Джалилова С.Н., ¹Ерофеев В.И., ²Ерофеев М.В., ²Рипенко В.С.

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

²Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия

dzhalilovas@mail.ru

Проведены исследования по влиянию плазменной активации на кислотные свойства цеолитных катализаторов Н-ЦКЕ-ХМ[1], модифицированных 1 и 3 % ZnO. Активация производилась низкотемпературной плазмой диффузного разряда, формируемой в воздухе атмосферного давления при подаче 4-х наносекундного импульса напряжения амплитудой 25 кВ от генератора NPG-3500N на острый катод с малым радиусом кривизны равным 0.2 мм [2]. Максимальная концентрация электронов в плазме диффузного разряда составляла 10^{14} см⁻³ при вкладываемой средней мощности 2 Вт. Образец катализатора в кварцевой кювете помещался на заземленный анод газоразрядной камеры на расстояние 8 мм от острия катода, после чего подвергался плазменной обработке в течение 10 минут с частотой 100 Гц, что соответствует 60000 импульсам. Конверсию ПБФ состава: метан – 0,3; этан – 3,0; пропан – 80,9; бутаны – 15,8 мас. % проводили на модифицированных цеолитных катализаторах по методике, описанной в [3]. Исследование процесса конверсии ПБФ на исходном цеолите Н-ЦКЕ-ХМ показало, что с ростом температуры с 550 до 600 °С и объемной скорости подачи ПБФ 240 ч⁻¹ выход жидких углеводородов повышается с 48,2 до 52,4 % (табл. 1).

Концентрация слабокислотных центров для Н-ЦКЕ-ХМ, определенная по количеству десорбированного аммиака, составляет 600, а для сильнокислотных центров 421 мкмоль/г (табл. 2).

Таблица 1 - Кислотные свойства цеолитных катализаторов, модифицированных ZnO, и активированных плазмой

Катализатор	T _{макс} , °С		Концентрация кислотных центров, ммоль/г		
	T ₁	T ₂	C ₁	C ₂	C _{сум}
Н-ЦКЕ-ХМ	185	305	600	421	1021
1 % ZnO/99 % Н-ЦКЕ-ХМ	185	310	576	151	727
1 % ZnO/99 % Н-ЦКЕ-ХМ (активация плазмой)	210	315	707	201	908
3 % ZnO/97 % Н-ЦКЕ-ХМ	190	310	572	167	739
3 % ZnO/97 % Н-ЦКЕ-ХМ (активация плазмой)	215	325	764	220	984

Примечание: T₁, T₂ – температура максимумов пиков для форм 1 и 2 десорбции аммиака; C₁, C₂ и C_{сум} – концентрации кислотных центров в формах 1, 2 и суммарная соответственно.

Модифицирование Н-ЦКЕ-ХМ 1-3 % ZnO приводит к изменению их кислотных свойств. Концентрации слабокислотных центров для 1 % ZnO/99 % Н-ЦКЕ-ХМ снижается до 576 мкмоль/г по сравнению с 600 мкмоль/г для Н-ЦКЕ-ХМ, с дальнейшим повышением содержания от 1 до 3 % ZnO в Н-ЦКЕ-ХМ уменьшается до 572 мкмоль/г.

1. Ерофеев В.И., Коваль Л.М. Пат. России № 2313487. 2007. Оpubл.: 27.12.2007. Бюл. № 36.
2. Erofeev M. V., Ripenko V. S., Shulepov M. A., Tarasenko V. F. Generators of diffuse plasma at atmospheric pressure. Instruments and Experimental Techniques. 2017. V. 60. N. 2. P. 287-289.

DOI: 10.17223/9785946218412/512

АГРЕГАТИВНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ СВЕРХТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ, ПРИРОДНОГО АСФАЛЬТИТА И ПРОДУКТОВ ИХ КОНВЕРСИИ В СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ВОДЕ

¹Антипенко В.Р., ¹Петренко Т.В., ²Федяева О.Н., ²Востриков А.А.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия
avr@ipc.tsc.ru, fedyaeva@itp.nsc.ru

Цель настоящей работы – сравнительная характеристика устойчивости к осаждению асфальтенов природного асфальтита, сверхтяжелой нефти и жидких продуктов их конверсии в сверхкритической воде (СКВ). Объекты исследования – природный асфальтит ивановского месторождения, сверхтяжелая нефть Ашальчинского месторождения и жидкие продукты их конверсии в СКВ, заметно отличающиеся от исходных объектов содержанием смол и асфальтенов, а также их соотношением. Оценка агрегативной устойчивости основана на анализе кривых изменения во времени оптической плотности раствора образца в смеси толуол:гексан (1 : 3), отражающих процесс флокуляции и осаждения асфальтенов. В процессе исследования на спектрофотометре UVIKON-943 также определялись удельные показатели поглощения растворов образцов до и после осаждения асфальтенов.

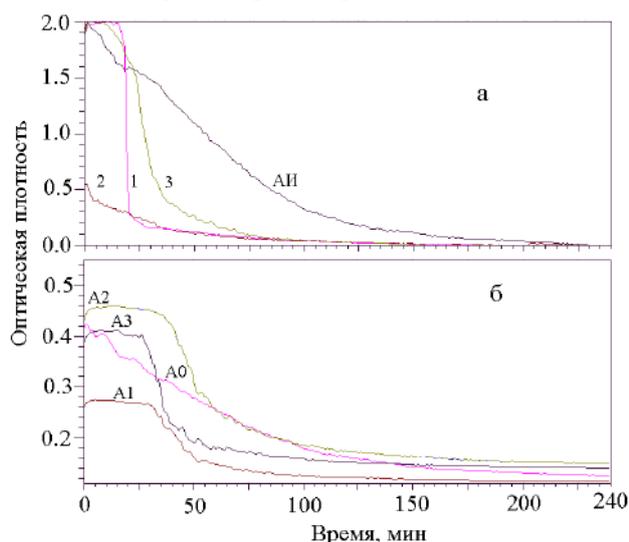


Рисунок 1 – Кривые изменения оптической плотности. (а) - ивановского асфальтита (АИ) и полученных из него нефтей (1–3), (б) – асфальтенов, выделенных из АИ и из продуктов конверсии (А0, А1, А2, А3)

перечисленных объектов (рисунок 1б), наибольшей агрегативной устойчивостью обладают асфальтены исходного асфальтита (А0); 4) У ашальчинской нефти наблюдается очень медленный (60–90 минут) процесс флокуляции затем медленное возвращение к исходной оптической плотности за счет осаждения части асфальтенов. Продукты СКВ конверсии сверхтяжелой ашальчинской нефти проявляют высокую агрегативную устойчивость. Незначительное изменение оптической плотности их раствора, отражающее процесс флокуляции, наблюдается только в одном случае из четырех; 5) Для всей совокупности изученных объектов наблюдается функциональная связь между соотношением удельного показателя поглощения, рассчитанного до и после осаждения асфальтенов и индексом устойчивости нефтяной системы – отношением содержания смол к содержанию асфальтенов.

Полученные результаты заключаются в следующем: 1) Исходный асфальтит характеризуется высокой агрегативной устойчивостью. На кривой изменения оптической плотности у асфальтита не наблюдается стадии флокуляции, процесс осаждения асфальтенов происходит очень медленно (рисунок 1а); 2) Жидкие продукты конверсии асфальтита заметно отличаются от исходного объекта и между собой параметрами, характеризующими их агрегативную устойчивость. Только для одной нефти, полученной из асфальтита в присутствии добавок алюминия (2 на рисунке 1а), характерна высокая агрегативная устойчивость, аналогичная асфальтиту. Две другие нефти (1, 3 на рисунке 1а) характеризуются ярко выраженными быстрыми стадиями флокуляции и осаждения асфальтенов; 3) В случае асфальтенов, выделенных из

DOI: 10.17223/9785946218412/513

**ОСОБЕННОСТИ СОСТАВА И СВОЙСТВ НЕФТЕЙ ЦЕНТРАЛЬНОЙ ЧАСТИ
ВОСТОЧНОЙ СИБИРИ**

¹Ахмедова А.Р., ^{2,3}Серебренникова О.В., ¹Шиганова О.В.

¹*Акционерное общество Сибирский научно-исследовательский институт геологии,
геофизики и минерального сырья, Новосибирск, Россия*

²*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*

³*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
ahmedova-sniiggims@yandex.ru, ovs49@yahoo.com*

Запасы нефти центральной части Восточной Сибири являются важнейшим элементом нефтегазового комплекса "Восточная Сибирь – Тихий океан". На данной территории открыто свыше 40 месторождений углеводородов, многие из которых (Юрубчено-Тохомское, Собинское, Верхнечонское, Талаканское и др.) по запасам относятся к категориям гигантские и крупные. Данные о составе и свойствах нефтей определяют пути дальнейшей ее транспортировки, переработки и стоимость. В настоящей работе приведены результаты анализа 81 образца нефти из основных нефтегазовых комплексов (рифей-венд-кембрийские отложения) центральной части Восточной Сибири.

В соответствии с ГОСТ Р 51858-2002 по плотности нефти Байкитской антеклизы и Катангской седловины относятся к особо легким (до 830,0 г/кг/м³) и легким (830,1 – 850,0 кг/м³). Среди нефтей Непско-Ботуобинской антеклизы встречаются все типы нефтей от особо-легких до битуминозных (свыше 895,0 кг/м³), но преобладают средние (850,1 – 870,0 кг/м³) и тяжелые (870,1 – 895,0 кг/м³). Нефти Предпатомского прогиба – относятся к тяжелым (874,0 – 891,3 кг/м³). С увеличением глубины залегания и содержания насыщенных УВ плотность нефтей имеет тенденцию к снижению.

По содержанию серы изученные образцы подразделяются на два класса: малосернистые (до 0,60% серы): нефти Байкитской антеклизы, Катангской седловины, половина образцов Непско-Ботуобинской антеклизы и сернистые (0,61-1,43%): остальные нефти Непско-Ботуобинской антеклизы и Предпатомского прогиба.

По содержанию парафинов нефти относятся преимущественно к парафинистым (3,0 – 5,6 %) и малопарафинистым (0,7 – 2,5), но встречаются и беспарафиновые (до 0,5%). Содержание парафинов не зависит от возраста вмещающих отложений.

Температура начала кипения большинства нефтей ниже 100°C, а содержание бензиновой фракции 10 – 20%. В групповом углеводородном (УВ) составе преобладают насыщенные УВ, их содержание меняется в интервале 50 - 80 %. Содержание ароматических УВ в 2-4 раза ниже насыщенных и составляет 13 - 21%. По содержанию смолистых компонентов нефти Байкитской антеклизы преимущественно смолистые (5,5 – 11,6 %), Катангской седловины - смолистые (6,4 – 12,5 %) и высокосмолистые (15,3 – 27,0 %), а Непско-Ботуобинской антеклизы и Предпатомского прогиба – преимущественно высокосмолистые (15,3 – 30,3 %). Большинство нефтей Байкитской антеклизы и Катангской седловины практически не содержат асфальтенов (0,0 – 1,6 %), в отличие от нефтей Непско-Ботуобинской антеклизы и Предпатомского прогиба (0,0 - 9,7 % асфальтенов).

DOI: 10.17223/9785946218412/514

ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ РИСКИ ВОЗДЕЙСТВИЯ СЖИГАНИЯ ПОПУТНОГО НЕФТЯНОГО ГАЗА НА ОКРУЖАЮЩУЮ ПРИРОДНУЮ СРЕДУ

Алексеева М.Н., Яценко И.Г.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
amn@ipc.tsc.ru*

В нефтегазодобывающих регионах России в процессе добычи и перегонки нефти в отсутствие необходимого оборудования и инфраструктуры проводится сжигание растворенного в нефти попутного нефтяного газа (ПНГ). На долю Ханты-Мансийского АО приходится 43,7 % общероссийской добычи нефти. В 2017 г. при увеличении добычи (по сравнению с 2016 г.) ПНГ до уровня 35 млрд. м³ произошло уменьшение объема его сжигания (4,5 млрд. м³). Однако, вследствие неточности официальных оценок из-за недостатков или отсутствия автоматизированных систем измерения и учета ПНГ на факельных установках (ФУ), в задачах мониторинга уровня сжигания ПНГ перспективно применение космоснимков (КС). В рамках решения проблемы оценки риска загрязнения атмосферы и депонирующих сред снега, почвы и растительного покрова при сжигании ПНГ было проведено:

1) Обнаружение ФУ нефтегазового месторождения, расположенного в Ханты-Мансийском АО вблизи г. Сургут, с использованием авторских автоматических алгоритмов обработки КС Landsat 8, включающих метод расщепленного окна прозрачности и логарифмирование излучательной способности земной поверхности.

2) Картирование полигона наиболее высокотемпературных пикселей зоны теплового воздействия с центром расположения факела.

3) Построение зоны рассеивания вредных веществ при сжигании ПНГ на основе КС Landsat 8 и данных нефтегазодобывающего предприятия.

На месторождении при действующей ФУ в ГИС ArcMap был определен максимальный радиус зоны теплового воздействия длиной 260 м, площадь зоны - 0,1 км². Радиус зоны рассеивания загрязняющих веществ равен 1850 м при высоте трубы ФУ – 24,5 м, диаметре устья 0,85 и средней скорости выхода газовой смеси 494,06 м/с. В границах зоны вычислены приземные разовые концентрации загрязняющих веществ: азота диоксида, азота оксида, диоксида серы, сероводорода, бутана, гексана, пентана, метана, этана, бензапирена. Для оценки экологического риска воздействия сжигания ПНГ на окружающую среду следует особо обратить внимание на выбросы оксида углерода и сажи, максимальная разовая которых превышает или равна ПДК. Проведена классификация растительного покрова. На территории месторождения в зоне химического воздействия расположены болота площадью около 8 км² с различными типами растительности. Мохово-лишайниковая растительность способна чутко реагировать даже на самые небольшие загрязнения атмосферы (они гибнут, например, при концентрации сернистого газа 0,1 мг/м³). Выявлено, что низкорослой сосной занято 3,9 км² болота. При больших концентрациях загрязненного воздуха хвоя сосны может погибнуть в несколько часов. Установлено, что лиственные и смешанные породы в зоне химического воздействия занимают площадь 3,4 км². У лиственных пород выбросы загрязнителей вызывают огрубление листьев и ускоренное завершение вегетационного периода; ожоги, отмирание, иногда опадание листьев даже в июле; нарушение процесса фотосинтеза и дыхания; сокращение периода выработки кислорода деревьями; торможение роста. Например, сажа плотно закупоривает устьица листьев и плохо смывается дождями.

DOI: 10.17223/9785946218412/515

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ПЕРЕРАБОТКИ ОТЛОЖЕНИЙ АСФАЛЬТОСМОЛОПАРАФИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ В НЕФТЯНОЙ ОТРАСЛИ

¹Валиев Д.З., ¹Кемалов Р.А., ¹Кемалов А.Ф.

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия
public.mail@kpfu.ru

Важнейшей экологической проблемой в настоящее время является обращение с отходами, загрязненными нефтью и нефтепродуктами [1]. Рассматривая проблему утилизации нефтешламов, следует отметить, что нефтеотходы являются и ценным вторичным материальным ресурсом [2], потенциальным источником дополнительного сырья, которое можно перерабатывать с извлечением полезных продуктов или использовать в качестве топлива. Использование его в качестве сырья является одним из рациональных способов его утилизации, так как при этом достигается определенный экологический и экономический эффект [3].

По агрегатному состоянию нефтеотходы можно условно подразделить: на жидкие и твердые (рисунок 1).

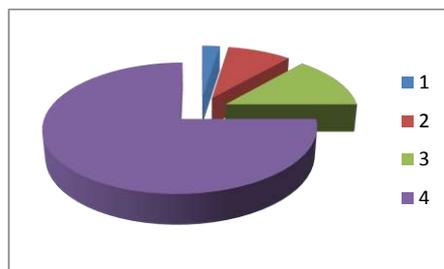


Рисунок 1 – Структура нефтеотходов нефтегазодобывающего предприятия: 1 – отходы ремонта; 2 – отложения АСП-В; 3 – нефтегрунт; 4 – жидкие нефтеотходы

Полная утилизация жидких нефтеотходов, даже на отдельно взятом предприятии, обеспечивает снижение общего количества нефтеотходов более чем на 70 % и возврат товарной нефти в ресурсооборот. Все твердые нефтеотходы, образующиеся на стадиях добычи, подготовки и транспортировки нефти и газа, можно подразделить на три типа: отходы ремонта, отложения асфальтосмолопарафиновых веществ (АСП-В), нефтегрунт. В работе [1] представлен состав нефтеотходов и подробно рассматриваются перспективные направления переработки отложений АСП-В.

Разработка и внедрение ресурсосберегающих технологий переработки отложений АСП-В с получением востребованных продуктов позволит снизить техногенную нагрузку на природные геосистемы и обеспечить более рациональное использование невозобновляемых природных ресурсов путем замены первичного сырья вторичным.

1. Валиев Д.З., Кемалов А.Ф., Кемалов Р.А. Анализ современного состояния проблемы предотвращения образования и утилизации отложений асфальтосмолопарафиновых веществ в нефтяной отрасли // Экспозиция Нефть Газ. – 2019. - №2. С. 103-108.
2. Ягафарова, Г.Г и др. Современные методы переработки нефтешламов. – М.: Химия, 2010. – 190 с.
3. Миллер, В.К. Комплексный подход к решению проблемы асфальтосмолопарафиновых отложений из высокообводненных нефтей (на примере нефтей месторождений Удмуртии): дис.... канд. техн. наук: 02.00.13 / Миллер Вероника Константиновна. – Москва, 2016, – 196 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/516

ПРЕВРАЩЕНИЕ ПРИРОДНОГО И ПОПУТНОГО НЕФТЯНОГО ГАЗОВ НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЦЕОЛИТНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ

А. А. Восмерилов, Л. Н. Восмерилова, Я. Е. Барбашин, А. В. Восмерилов

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
antonvosmerikov@gmail.ru*

В настоящее время низшие алканы, содержащиеся в природном и попутном нефтяном газе, не находят квалифицированного применения из-за высокой термодинамической устойчивости их молекул. В то же время они могут являться потенциальным сырьём для получения широкого спектра практически важных полупродуктов и продуктов, начиная от мономеров (олефины) и заканчивая различными моторными топливами (высокооктановые добавки к топливам). Повышение эффективности технологических процессов и создание новых технологий невозможно без разработки и внедрения в практику катализаторов, обладающих высокой активностью и селективностью, что определяет актуальность проведения исследований в этом направлении. Целью данной работы явилось изучение закономерностей превращения компонентов природного и попутного нефтяного газов в ароматические углеводороды на цеолитных катализаторах, модифицированных активными металлическими добавками.

Объектами исследований выступали: алюмосиликат, модифицированный методом пропитки цинком из расчёта его содержания 3,0 % мас. (Zn-AC), и галлийсодержащий цеолит структурного типа MFI ($\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Ga}_2\text{O}_3 = 40$, содержание в реакционной смеси Ga_2O_3 составляло 1,85 % мас., а Al_2O_3 – 3,01 % мас.), полученный гидротермальной кристаллизацией алюмокремнегеля, в котором часть алюминия замещалась на галлий (Ga-AC). В качестве исходного сырья ароматизации использовали пропан-бутановую фракцию (ПБФ) следующего состава (% мас.): пропан – 77,4; изобутан – 5,8; н-бутан – 16,8, и природный газ (ПГ) состава (% мас.): метан – 83,2; этан – 7,9; пропан – 5,0; изобутан – 2,0; н-бутан – 1,9.

Процесс превращения газообразных углеводородов в ароматические соединения изучали на стендовой установке проточного типа при атмосферном давлении, температуре реакции 400-650 °С и объёмной скорости подачи исходного сырья 250 ч⁻¹. Продукты реакции анализировали методом ГЖХ с использованием хроматографа «Хроматэк-Кристалл 5000.2».

Проведенные исследования показали, что состав исходного сырья оказывает существенное влияние на выход ароматических углеводородов. При использовании ПБФ он значительно выше, чем при использовании ПГ. Это объясняется тем, что с увеличением содержания в сырье углеводородов с большим числом атомов углерода в молекуле растёт скорость ароматизации. С повышением температуры процессов превращения ПБФ и ПГ наблюдается увеличение выхода целевого продукта на исследуемых катализаторах.

Анализ полученных данных позволяет заключить, что оба катализатора проявляют высокую активность в процессе ароматизации пропан-бутановой фракции. Селективность образования ароматических углеводородов при 550 °С на образцах Ga-AC и Zn-AC составляет соответственно 46,7 и 37,8 %, при практически полном превращении ПБФ. В составе образующихся жидких продуктов реакции преобладает бензол-толуол-ксилольная фракция (более 70 %), концентрация нафталиновых углеводородов не превышает 25 %.

Для достижения высокой эффективности процесса превращения низших алканов катализаторы должны обладать не только повышенной дегидрирующей и ароматизирующей активностью, но и низкой склонностью к коксообразованию. Проведенные исследования стабильности работы исследуемых катализаторов в процессе ароматизации ПБФ показали, что галлоалюмосиликат характеризуется более высокой стабильностью по сравнению с образцом Zn-AC.

Работа выполнена в рамках проекта № V.46.2.1 Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук.

DOI: 10.17223/9785946218412/517

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЖИДКИХ ПРОДУКТОВ СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ФЛЮИДНОЙ ЭКСТРАКЦИИ ГОРЮЧИХ СЛАНЦЕВ ДМИТРИЕВСКОГО И ЧИМ–ЛОПТЮГСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЙ

¹Петров А.В., ²Байшибилова В.Т., ¹Коваленко Е.Ю.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Томск, Россия
kovalenko@ipc.tsc.ru, venera@list.ru

Цель настоящей работы – изучение состава жидких продуктов (пиролизатов - П) термического растворения образцов горючих сланцев (ГС) Дмитриевского (Д) и Чим-Лоптюгского (ЧЛ) месторождений в среде бензола при сверхкритических условиях, считающегося одним из наиболее перспективных способов переработки ГС с получением жидких продуктов, наиболее близких по своему составу и свойствам к нефтяному сырью. Процесс осуществляли на лабораторной полупроточной установке при давлении 10 атм., с отбором экстрактов в интервалах температур до 200, 200–300 и 300–400 °С. Для характеристики П использовали данные определения элементного и компонентного составов, криоскопического измерения молекулярных масс, ИК Фурье-спектроскопии.

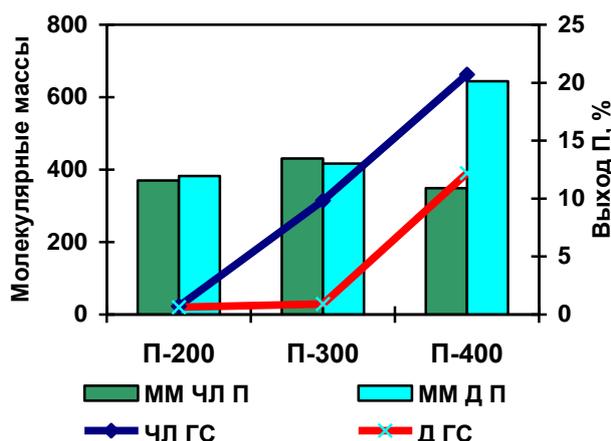


Рисунок 1 - Зависимость выхода пиролизатов от температуры проведения процесса и средние молекулярные массы (ММ) пиролизатов

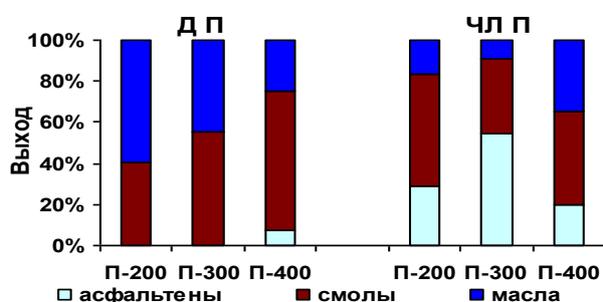


Рисунок 2 - Компонентный состав пиролизатов

При общей тенденции изменения значений отношения $H/C_{ат.}$ в ряду П-200, П-300, П-400, высокотемпературные П дмитриевского ГС менее ароматичны. П этого ГС имеют более высокие значения средних молекулярных масс, в меньшей степени концентрируют в своем составе гетероатомы, содержат больше масляных компонентов.

Как следует из рисунка 1, с ростом температуры проведения процесса в обоих случаях увеличивается выход П, и в сумме он достигает 20,7 и 12,2 % соответственно для ГС ЧЛ и Д месторождений. Характер кривых свидетельствует, что разложение органического вещества дмитриевского ГС происходит при более высоких температурах.

Полученные П различаются значениями средней молекулярной массы (рисунок 1), содержанием смолисто-асфальтеновых компонентов (рисунок 2) и гетероатомов, величиной атомного соотношения H/C (таблица 1).

Таблица 1 – Распределение гетероатомов в пиролизатах

Образец	Содержание, % мас.			$H/C_{ат.}$
	N	S	O	
ЧЛ П-200	0,54	6,69	12,48	1,52
ЧЛ П-300	0,90	11,69	12,39	1,36
ЧЛ П-400	1,31	8,90	9,55	1,33
Д П-200	0,51	0,91	4,18	1,50
Д П-300	0,48	0,94	3,80	1,41
Д П-400	0,48	1,28	9,55	1,47

DOI: 10.17223/9785946218412/518

ПОЛУЧЕНИЕ МЕЗАПОРИСТЫХ ЦЕОЛИТНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ДЛЯ КАТАЛИЗАТОРОВ АРОМАТИЗАЦИИ МЕТАНА

¹Жарнов К.Н., ²Степанов А.А., ²Коробицына Л.Л., ^{1,2}Восмерилов А.В.

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Томск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
rector@tsu.ru, canc@ipc.tsc.ru

Неокислительная конверсия метана в ароматические углеводороды представляет значительный интерес как эффективный способ утилизации природного и попутного газов. Известно, что эффективными катализаторами ароматизации метана являются высококремнеземные цеолиты, модифицированные молибденом. Одной из важных проблем является быстрая дезактивация катализаторов этого типа в результате интенсивного коксообразования. Наличие вторичной пористости в цеолитной матрице может способствовать диффузии активного компонента (Mo) в поры цеолита и улучшить транспорт синтезированных ароматических соединений на поверхность катализатора, что должно привести к улучшению его активности и стабильности.

Целью настоящей работы явилось исследование активности Mo/ZSM-5 катализаторов, полученных на основе цеолитов с иерархической системой пор. Цеолиты с мезопористой структурой получали методом гидротермального синтеза с использованием в качестве вторичных темплатов высокодисперсных порошков технического углерода марки ПЗ54 (ИППУ СО РАН), а также наноглобулярного углерода, полученного методом импульсного газодетонационного синтеза (Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН). Исследование текстурных характеристик полученных цеолитов показало, что использование углеродных темплатов при синтезе приводит к увеличению объема мезопор от 0,02 до 0,07 см³/г. 4%Mo/ZSM-5 катализаторы получали методом твердофазного синтеза путем смешения микропористых и мезопористых цеолитов с наноразмерным порошком Mo. Полученные смеси прокаливали при 540 °С в течение 4 часов. Процесс превращения метана изучали на установке проточного типа при температуре 750°С, объемной скорости подачи сырья 1000 ч⁻¹ и атмосферном давлении. Результаты исследований активности полученных катализаторов в процессе неокислительной конверсии метана приведены на рис. 1

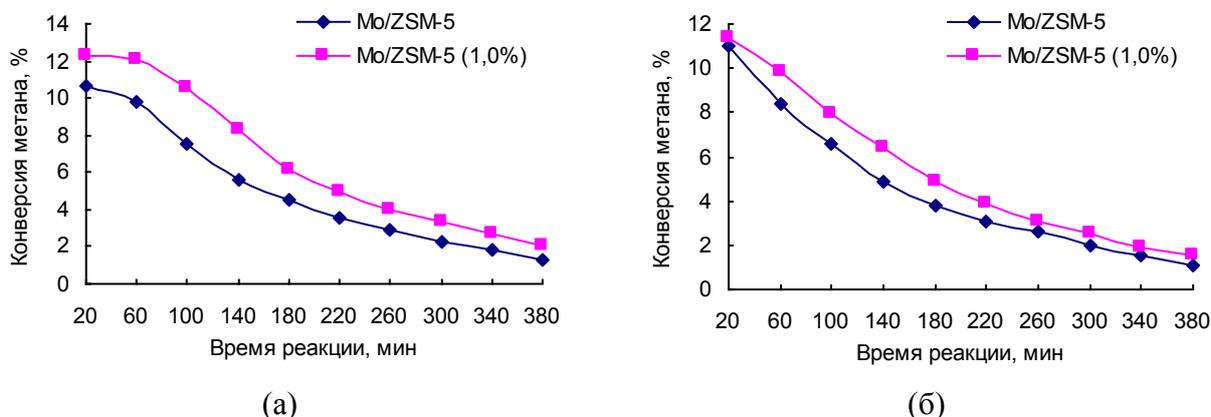


Рисунок 1 – Зависимость конверсии метана от времени реакции на 4%Mo/ZSM-5 катализаторах, полученных на основе цеолитов с техническим (а) и наноглобулярным (б) углеродом

Видно, что добавление углерода при синтезе приводит к образованию мезопористой структуры, что приводит к увеличению активности и стабильности катализаторов. Наибольшую активность проявляет Mo/ZSM-5 катализатор, полученный на основе цеолита с техническим углеродом.

DOI: 10.17223/9785946218412/519

ЭКСТРАКЦИОННАЯ ДЕСУЛЬФУРИЗАЦИЯ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

¹Коботаева Н.С., ¹Скороходова Т.С.¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
nat@ipc.tsc.ru

В настоящее время происходит стремительное развитие научных исследований и технологических разработок в области «зеленой химии». Одним из важных направлений «зеленой химии» является замена традиционных летучих органических растворителей.

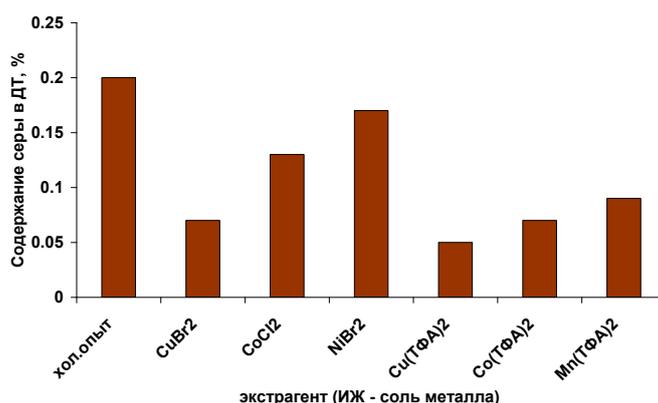
Перспективным представляется использование ионных жидкостей (ИЖ), так как эти соединения не горючи, термически устойчивы, обладают низким давлением паров и низкой токсичностью, а также могут быть использованы повторно.

Как правило, ИЖ состоят из объемного, несимметричного органического катиона и слабо координирующего неорганического или органического аниона. Существует огромное количество органических катионов и анионов, которые могут быть соединены с образованием различных ИЖ, и это одна из наиболее важных особенностей этих соединений. ИЖ на основе катионов имидазолия ([Cnmim]⁺), пиридиния ([C₄py]⁺), тетраалкиламмония ([N_{6,2,2,2}]⁺) и тетраалкилфосфония ([P_{6,6,6,14}]⁺) являются наиболее распространенными. Из них самые популярные ИЖ с катионом 1,3-диалкилимидазолия, отличающиеся относительно простым способом синтеза и возможностью широко варьировать физико-химические свойства, изменяя в их составе только анион.

В последние годы ИЖ активно используются в нефтехимии для экстракционной очистки различных видов моторных топлив от СС соединений [1-2].

В данной работе для исследования ионных жидкостей в качестве экстрагентов сернистых соединений из дизельного топлива были синтезированы ионные жидкости на основе имидазола, созданы экстракционные системы ИЖ с солями металлов и рассмотрена возможность применения комплексов ИЖ для удаления СС соединений из дизельного топлива.

Рисунок 1 иллюстрирует зависимость остаточного содержания серы в дизельном топливе от вида экстрагента, используемого в процессе экстракции.



Таким образом, можно сделать вывод, что комплексы ионных жидкостей с солями металлов вполне могут быть пригодны для использования в качестве экстрагентов удаления серы из дизельного топлива.

1. Асланов Л.А., Анисимов А.В. Нефтехимия, 2004, т. 44, № 2, с. 83—88.

2. Extractive desulfurization of fuel oil with metal-based ionic liquids Teng-Jie Ren a, Juan Zhang, Yan-Hui Hua, Jun-Pan Li a, Meng-Shuai Liu b, Di-Shun Zhao Chinese Chemical Letters 26 (2015) 1169–1173.

DOI: 10.17223/9785946218412/520

БИОДЕСТРУКТИВНЫЕ ПРОЦЕССЫ В НЕФТЕЗАГРЯЗНЕННОЙ ГЛИНИСТОЙ ПОЧВЕ

Стрельникова Е.Б., Сваровская Л.И., Русских И.В., Серебrenникова О.В.
 Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
 Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
 seb@ipc.tsc.ru

В лабораторных условиях проведен ряд экспериментов по биодеструкции нефтезагрязненной глинистой почвы (НГП), отобранной в 2018 г. после аварии на магистральном нефтепроводе на территории Томской области, которая произошла в июне 2016 г. Загрязнение почвы составляет 3 г/кг. Концентрация органического вещества в пробах фоновой глинистой почвы не превышает 0.2 г/кг. Для стимуляции окислительной ферментативной активности почвенной микрофлоры применяли торф в концентрации 10 % от веса почвы и 2.5 %-ный раствор композиции, содержащей ПАВ и азотистые компоненты (табл. 1.).

Состав экстрактов органического вещества почвы, до и после 30-суточной деструкции, анализировали методами ГЖХ, хромато-масс-спектрометрии и ИК – спектрометрии. Используя значения оптической плотности полос поглощения в ИК - спектрах при 1730, 1600, 1465 и 1380 см⁻¹, рассчитаны коэффициенты ароматичности (C_{ар}), разветвленности (C_р), окисленности (C_{ок}) и алифатичности (C_{ал}), характеризующие ферментативную активность микрофлоры в процессах деструкции углеводов, загрязняющих почву [1]. Добавление торфа и раствора композиции повышает активность почвенной микрофлоры, особенно в процессах утилизации парафинов, что увеличивает коэффициенты C_{ар}, C_р, C_{ок} и снижает C_{ал}. Стимулирующее действие применяемых субстратов подтверждено при анализе экстрагированных нефтей методом ГЖХ. Полученные данные применяли для расчета коэффициента биодеструкции K_i (табл. 1).

Таблица 1 – Коэффициенты – показатели окислительной активности микроорганизмов

Коэффициенты	Образцы почв				
	НГП (контроль)	НГП +торф	НГП +комп	НГП+ торф+комп	НГП+торф+ комп+травы
$C_{ар} = D_{1600}/D_{1465}$	0.11	0.15	0.16	0.14	0.19
$C_{ал} = (D_{1380} + D_{1465})/D_{1600}$	14.32	10.51	10.26	11.67	8.84
$C_{р} = D_{1380}/D_{1465}$	0.53	0.60	0.65	0.58	0.66
$C_{ок} = D_{1730}/D_{1465}$	0.34	0.88	0.72	0.69	0.89
$K_i = (Pr+Ph)/(C_{17}+C_{18})$	1.61	1.94	2.33	2.18	2.61

В эксперименте с растениями, благодаря значительной деструкции парафиновых структур, понижается коэффициент C_{ал}, максимально увеличиваются C_{ар}, C_{ок} и C_р. Применение фиторемедиации приводит к сукцессионным изменениям почвенного биоценоза, при развитии за счет корневых выделений, что стимулирует численность, разнообразие и активность микроорганизмов. Следовательно, экспериментальное решение по применению стимулирующих субстратов оказывает положительное влияние на процессы деструкции, что может быть использовано при разработке метода рекультивации нефтезагрязненных глинистых почв.

DOI: 10.17223/9785946218412/521

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ НИЗКОЧАСТОТНОГО АКУСТИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СТАБИЛЬНОСТЬ ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЙ

Ю.В. Лоскутова, Н.В. Юдина

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
reolil@ipc.tsc.ru

С помощью метода «Bottle test» изучено влияние продолжительности низкочастотного акустического воздействия и температурного фактора на устойчивость 50 и 60 % мас. водонефтяных эмульсий смолистой парафинистой нефти Игнянетского месторождения, полученных при смешивании нефти и дистиллированной воды в течение 10 минут при комнатной температуре. Стабильные во времени водонефтяные эмульсии подвергались 0,5 - 5 минутной низкочастотной акустической обработке (НАО) на частоте 50 Гц, внешнем напряжении ~100 В. Далее в течение 1 ч эмульсий отстаивались при 20 и 50 °С.

После отстаивания в верхнем слое 50 % мас. эмульсии присутствуют крупные глобулы воды, но выделения свободной водной фазы не происходит (рисунок 1, таблица 1). С увеличением времени воздействия с 0,5 до 5 минут НАО стабильность 50 % мас. эмульсии возрастает, однако, нагревание до 50 °С не приводит к появлению свободной воды.

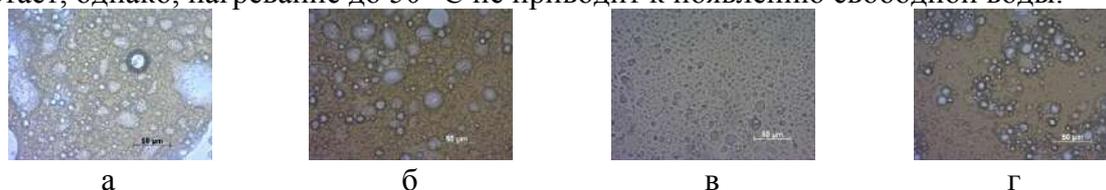


Рисунок 1 – Микрофотографии 50 % мас. эмульсий после НАО и термостатирования при 50 °С: 0,5 мин НАО (а), 1 мин НАО (б), 3 мин НАО (в), 5 мин НАО (г)

Таблица 1 – Размеры капель 50 и 60 % мас. эмульсий до и после НАО (1 ч при 50 °С)

Образец эмульсии	Размеры капель в эмульсиях с содержанием воды, мкм			
	50 % мас.		60 % мас.	
	d_{\min}	d_{\max}	d_{\min}	d_{\max}
без НАО	2,1	67,2	1,7	32,0
0,5 мин НАО	1,8	71,7	2,2	131,6
1 мин НАО	2,1	40,0	3,5	149,6
3 мин НАО	2,2	17,8	2,9	21,0
5 мин НАО	1,9	20,5	1,1	14,3

Минимальные размеры капель d_{\min} эмульсий мало зависят от времени НАО и температуры (от 1,1 до 3,5 мкм), а максимальные размеры d_{\max} в 50 % мас. эмульсиях существенно снижаются с ростом времени воздействия – с 72 мкм при 0,5 мин НАО до 20 мкм при 5 мин НАО.

В верхнем слое 60 % мас. необработанной полев эмульсии после термостатирования при 20 и 50 °С также происходит формирование крупных глобул воды, но полного разрушения эмульсии не наблюдается. Несмотря на отсутствие свободной воды, после нагревания обработанной в течение 0,5 - 3 мин эмульсии наблюдается значительный рост размеров капель воды. Дальнейшее увеличение времени НАО, напротив, стабилизирует эмульсию, что сопровождается резким снижением размеров частиц водной фазы.

Таким образом, низкочастотное акустическое воздействие на эмульсии смолистой парафинистой нефти Игнянетского месторождения при концентрации воды, близкой к критической, приводит к частичному ее разрушению без высвобождения свободной воды. Происходит формирование сложной эмульсии с каплями как минимального (~1 - 2 мкм), так и максимального размера (~130 - 150 мкм), для разрушения которых необходимо предпринимать дополнительные методы подготовки нефти.

DOI: 10.17223/9785946218412/522

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНГИБИРУЮЩЕЙ ЗАЩИТЫ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

¹Лоскутова Ю.В., ^{1,2}Савельева А.В., ³Калистратов В.А.¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия³ООО ПКФ «Экси-Кей», Томск, Россия

reoloil@ipc.tsc.ru, anna_savel@mail.ru, axi-key@mail.ru

В последние годы значительно возрос интерес к использованию магнитного поля при деэмульсации нефти, для борьбы с отложением неорганических солей и нефтяного осадка [1, 2]. Это связано с появлением на рынке широкого ассортимента высокоэнергетических магнитов на основе редкоземельных элементов. Целью исследований являлось изучение антикоррозионной активности магнитного поля, создаваемого магнитным активатором марки «МАУТ/ЖВ-100-ВК» (ООО ПКФ «Экси-Кей»), на пластовые воды с различной степенью минерализации.

Магнитную обработку (МО) пластовой воды Столбового (СМ) (о.м. 30.4 г/л и pH 8) и высокоминерализованной Игнялинского ИМ (о.м. 496 г/л и pH 2.7) месторождений проводилась при комнатной температуре в проточном режиме через одну (МО1) или последовательно через две (МО2) металлические трубки ($d_{\text{вн}} = 3.5$ мм, $l = 32$ см), расположенные внутри магнитного устройства, со скоростью 7.5 мл/мин, что соответствует 12 - 15 м/с при пересчете на линейную скорость в трубопроводе. Коррозионную активность МО оценивали гравиметрическим методом на пластинах, изготовленных из трубной стали марок 32Г1, 09Г2С и 70Л при 40 и 70 °С в течение 24 ч (таблица 1).

Таблица 1 – Результаты испытаний ингибиторной защиты магнитного поля

Марка стали	До МО, мм/год	Скорость коррозии					
		МО1 40 °С		МО2 40 °С		МО2 70 °С	
		г/м ² ·ч	мм/год	г/м ² ·ч	мм/год	г/м ² ·ч	мм/год
СМ							
32Г1	0,225	0,002	0,002	0,002	0,002	0,009	0,11
09Г2С	0,325	0,008	0,009	0,47	0,052	0,096	0,107
70Л	0,225	0,004	0,005	0,006	0,007	0,006	0,007
ИМ							
32Г1	0,024	0,012	0,014	0,003	0,003	0,077	0,009
09Г2С	0,235	0,174	0,195	0,043	0,048	1,08	1,21
70Л	0,046	0,020	0,022	0,023	0,026	0,018	0,02

Анализ микроструктуры пластовой воды после МО при разных температурах показал, что МО способствует формированию мелких сферических кристаллитов. (рисунок 1).

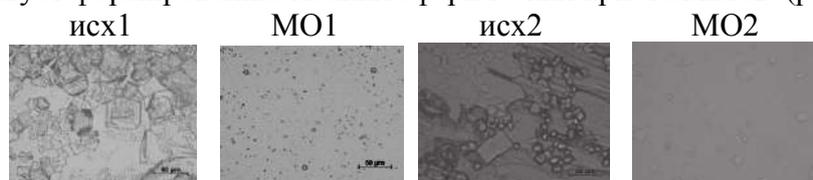


Рисунок 1 – Микроструктура солей пластовой воды СМ (1) и ИМ (2) до и после МО (x400)

Таким образом, МО пластовых вод различной минерализации при 40 °С дает максимальную антикоррозионную защиту на образцах марганцовистой стали марки 32Г1 (до 99 %). Высокие значения ингибиторной защиты при различных условиях эксплуатации (температура, количество циклов МО), наблюдаются после обработки пластовой воды на образцах стали 70Л. Для защиты от коррозионных процессов трубопровода из низколегированной стали марки 09Г2С в высокоминерализованной пластовой воде ИМ устройство МАУТ использовать не рекомендуется.

DOI: 10.17223/9785946218412/523

ИССЛЕДОВАНИЕ УГЛЕВОДОРОДНОГО СОСТАВА ТЯЖЕЛЫХ СМОЛ ПИРОЛИЗА

¹Кемалов Р.А., ¹Кемалов А.Ф., ¹Сайфуллина М.Н.,²Сальманов Р.С., ¹Азизов Д.К., ¹Кемалов М.А.¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия
public.mail@kpfu.ru, office@kstu.ru

Тяжелые пиролизные смолы (ТПС) состоят из циклических, полициклических, ароматических, алкилзамещенных ароматических и непредельных углеводородов [1], способные к сильным межмолекулярным взаимодействиям, что ведет к образованию сложных структурных единиц и структурной неоднородности. Подобная система чувствительна к внешним воздействиям. С учетом этих особенностей состава ТПС, представляют интерес исследования перестройки системы, ее динамика при изменении концентрационных и температурных условий. Чтобы выявить эти изменения, мы провели исследования образцов ТПС с применением метода импульсного ЯМР, как метода наиболее чувствительного к изменению молекулярной подвижности.

Исследовались состав и физико-химические свойства тяжелых смол пиролиза бензина, этановых и пропан-бутановых фракций [2]. Предварительно атмосферной перегонкой исходной ТПС были получены образцы с различной глубиной отбора легких фракций и температурой начала кипения. Групповой углеводородный состав образцов определяли методом импульсного ЯМР [3]. В работе определены параметры протонной магнитной спин-спиновой релаксации в интервале температур 20-100°C, которые позволили сделать выводы о молекулярной подвижности и структурных изменениях в полученных образцах ТПС. Измерения времен спин-спиновой релаксации T_{2i} производились с использованием методики Карра-Парселла-Мейбум-Гилла $(90^\circ-\tau-(180^\circ-2\tau))_n$ [4]. Температурные зависимости исходного образца ТПС АО «Нижнекамскнефтехим» свидетельствуют о наличии в образцах НТПС трех фаз «а», «в» и «с», соответствующих трем группам протонов с временами релаксации T_{2a} , $T_{2в}$ и $T_{2с}$, обладающих разной молекулярной подвижностью, в то время, как для образца ТПС ОАО «Казаньоргсинтез» наблюдаются лишь два времени релаксации T_{2a} и $T_{2в}$. При этом, значения $T_{2с}$ НТПС и $T_{2в}$ ОТПС, примерно, совпадают по величине, но отличаются большей подверженностью структурным изменениям в НТПС. Полученные данные позволяют сделать вывод о наличии в НТПС высокоподвижной фазы «а», в которой предоставлена свобода молекулярной перестройки системы НТПС. В ОТПС сигнал высокоподвижных легких углеводородов, составляющих дисперсионную среду, по-видимому, налагается на сигнал от протонов воды, а небольшое значение времен релаксации T_{2a} и $T_{2в}$ свидетельствует о большей структурированности ОТПС. Такое поведение образца ОТПС объясняется высоким содержанием воды – 12%, в то время как в образце НТПС этот показатель регламентирован и составляет не более 0,3-0,5 % мас.

1. Беренц А.Д., Воль-Эпштейн А.Б., Мухина Т.Н., и др. Переработка жидких продуктов пиролиза. – М.: «Химия», 1985. – 213 с.

2. Гимаев Р.Н., Кузеев И.Р., Абызгильдин Ю.М. Нефтяной кокс. – М.: «Химия», 1992. – 80 с.

3. Кашаев Р.С., Тарасов В.Ф., Идиатуллин З.Ш., и др. Малогабаритные автоматизированные релаксометры ЯМР-02РС и Z80. Приборы и техника эксперимента. – 1993. – №1. С.242-243.

4. Meiboom S, Gill D. Review of Scient Instr. 1958; 29: p. 688.

DOI: 10.17223/9785946218412/524

СОЗДАНИЕ АДГЕЗИОННОЙ ДОБАВКИ ДЛЯ СТАБИЛИЗИРУЮЩЕЙ ДОБАВКИ К ЩЕБЕНОЧНО-МАСТИЧНОМУ АСФАЛЬТОБЕТОНУ

¹Кемалов Р.А., ¹Кемалов А.Ф., ¹Сайфуллина М.Н.,

²Сальманов Р.С., ¹Азизов Д.К., ¹Кемалов М.А.

¹*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия*

²*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия*

public.mail@kpfu.ru, office@kstu.ru

С учетом все возрастающих транспортных потоков и нагрузки на дорожную одежду, щебёночно-мастичный асфальт является идеальным типом покрытия для автодорог, как в настоящее время, так и в будущем. Концепция, лежащая в основе технологии щебёночно-мастичного асфальтобетона (ЩМА), заключается в прочности каркаса, заполненного вяжущим материалом, дроблеными фракциями и наполнителями [1]. Вяжущие материалы придают покрытию долговечность, стойкость по отношению к дорожным нагрузкам и погодным условиям [2].

Принципиальная разница между ЩМА и обычным асфальтобетоном заключается в том, что допуск на размер щебня в асфальтобетонной смеси намного шире, чем в ЩМА. Обусловлено это наличием большего объема пустот в асфальтобетонной смеси, которые необходимо заполнить более мелкими фракциями. В ЩМА основную структуру составляет крупный щебень, а мелкий служит только для создания "мастики", заполняющей пустое пространство в щебёночном скелете. Тем самым достигается лучший контакт минеральной части и битумного вяжущего.

Однако при укладке дорожного полотна из щебёночно-мастичного асфальтобетона одной из важнейших проблем остается адгезия (прилипание) битумного материала к камню [3]. Решение данной проблемы рассматривалось в рамках создания стабилизирующих добавок к ЩМА. Наиболее актуальным, на наш взгляд, было бы использование не стабилизирующей добавки, требующей предварительного модифицирования битумов, используемых для приготовления ЩМА, а комплексной структурирующей добавки, которая с одной стороны содержала бы полимерный модификатор, с другой – активный стабилизирующий и армирующий компонент.

В результате были разработаны полимерные модификаторы, которые увеличивают адгезионные взаимодействия внутри структуры покрытия. В качестве исходного битума были взяты битум дорожный БНД 60/90 парафино-нафтового основания.

В разработанном полимерном модификаторе в качестве пластификатора был выбран полимер, обладающий концевыми SH-группами. Предположительно между водородом данной группы и атомом кислорода на поверхности минерального камня образуется водородная связь. Происходит армирование системы. В совокупности с водородными связями и возможным образованием химических связей между серой в битум-полимерной композиции и металлами в камне усиливает адгезионное соединение в щебёночно-мастичном асфальтобетоне.

1. Сюняев З.И. Нефтяные дисперсные системы. – М.: Химия, 1990. – 226 с.

2. Кинлок Э. Адгезия и адгезивы (перевод с англ. А. Б. Зильберман). – М.: Мир, 1991. – 484 с.

3. Кемалов А.Ф., Кемалов Р.А. Научно-практические основы физико-химической механики и статистического анализа дисперсных систем. – Казань: КГТУ, 2008. – 472 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/525

МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ВОДОБИТУМНЫЕ ЭМУЛЬСИИ

¹Кемалов Р.А., ¹Кемалов А.Ф., ¹Сайфуллина М.Н.,

²Сальманов Р.С., ¹Азизов Д.К., ¹Кемалов М.А.

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия
public.mail@kpfu.ru, office@kstu.ru

В настоящее время определяющей тенденцией развития дорожной отрасли развитых мировых стран является все более широкое использование битумных эмульсий (БЭ) в качестве новых вяжущих материалов холодного способа применения. Это прежде всего, связано с экономическими, экологическими и рядом технологических преимуществ БЭ перед жидкими битумами.

В России битумные эмульсии являются относительно новым видом вяжущего. В связи с этим в настоящее время в РФ доля БЭ в общей структуре органических вяжущих материалов не превышает 1.5%, в то время как в развитых странах этот показатель достигает 35% [1].

Нами уделено особое внимание выбору модифицирующих добавок к БЭ, в качестве которых на первом этапе использовались синтезированные продукты оксиэтилирования спиртов (ПОС) (традиционно выступающие в роли пленкообразующих веществ в составе изоляционных материалов), вызывающие увеличение степени межмолекулярных взаимодействий (ММВ) из-за высокой реакционной способности присутствующих в их составе оксиэтилированных групп.

В результате проведенных исследований установлено, что при введении синтезированных ПОС в состав битумов марок БНД 60/90 и 90/130, характеризующихся высоким содержанием прямоцепочных высокомолекулярных n-алканов, а именно от 5 % и выше, происходит увеличение упруго-деформационных и малакометрических свойств модифицированных битумов.

Для увеличения адгезионно-прочностных характеристик модифицированных битумов одновременно в присутствии ПОС, использовались синтезированные низкомолекулярные полимеры серии СПД с различным молекулярно-массовым распределением (ММР) – от 300-1200 а.м.е. Обнаружено, что с увеличением ММР вводимого СПД в состав композиционного битумного вяжущего коллоидно-химическая устойчивость против расслоения БЭ уменьшается [2].

Таким образом, в данной исследовательской работе выполнен ряд задач. Во-первых, выполнена основная цель работы - повышение адгезии битумной плёнки с поверхностью минерального материала при помощи введения модификаторов. Во-вторых, получение высоких значений малакометрических свойств, что значительно улучшает качество битума как товарного продукта.

В результате проведенных исследований были получены водобитумные эмульсии, проведена оценка влияния количества битумной и водной фаз на свойства водобитумных эмульсий и битумной плёнки на поверхности каменного материала, осуществлена модификация эмульсий полимерными добавками и синтезированными продуктами ПОС. Установлено влияние введенных добавок на эмульгируемость, устойчивость полученных эмульсий и на закономерности значений индекса распада.

1. Kemalov, A.F. and R.A. Kemalov, 2013. Practical Aspects of Development of Universal Emulsifiers for Aqueous Bituminous Emulsions. World Applied Sciences Journal, 23 (6): 858-862. DOI: 10.5829/idosi.wasj.2013.23.06.13103.

2. Кемалов А.Ф. Интенсификация производства окисленных битумов и модифицированные битумные материалы на их основе. – Дисс. докт. техн. наук. Казань: КГТУ, 2005. – 354 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/526

**ПОЛУЧЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ БИТУМНЫХ ЭМУЛЬСИЙ
НА ОСНОВЕ НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ**

¹Кемалов Р.А., ¹Кемалов А.Ф., ¹Сайфуллина М.Н.,

²Сальманов Р.С., ¹Азизов Д.К., ¹Кемалов М.А., ¹Аюпов Р.Р.

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия
public.mail@kpfu.ru, office@kstu.ru

Компонентный состав современных битумных эмульсии (БЭ) включает в себя в % мас. битум (30-80), воду (15-70), эмульгатор (0,15-3), кислоту (0,1-1), растворитель (0,5-3), модификатор (2-10), стабилизатор (0,05-0,5), разжижитель (5-30) [2].

Приготовление БЭ осуществлялось на основе компонентов ПАВ неионогенного характера, в частности этоксилатов натуральных высших жирных спиртов фракций C₁₂-C₁₄, где соотношение углеводородных звеньев по отношению к битуму и оксиэтиленовых звеньев по отношению к водной части наиболее оптимально, продуктов оксиэтилирования спиртов (ПОС) с целью получения стабильной битумной эмульсии, отличающейся значительным сопротивлением истиранию при деформации и дорожного битума марки БНД 60/90 НГДУ «Зюзеенефть», отличающейся высоким содержанием парафинов (более 4 % мас.). Известно, что структура битума по А.С. Колбановской значительно зависит от содержания парафина. При их содержании более 3% возникает кристаллизационный каркас из них, сообщающий системе жесткость и уменьшается интервал пластичности.

Эмульсии имеют вязкую консистенцию в отличие от эмульсии, содержащей катионоактивный эмульгатор. Было выявлено, что при увеличении содержания этоксилатов натуральных высших жирных спиртов фракций C₁₂-C₁₄ с 1 до 3% мас., происходило увеличение стабильности с увеличением вязкостных характеристик, так же на устойчивость водо-битумных эмульсий повлияло и изменение концентраций ПОС, вводимых в концентрациях от 0,75 до 1,75% мас. К тому же, одной из проблем использования битумной эмульсии является нанесение ее на наклонную поверхность. Для решения данной проблемы рекомендуется повысить вязкость эмульсии путем применения этоксилатов натуральных высших жирных спиртов [2].

В дальнейшем было обнаружено, что с увеличением количества вводимого ПОС происходило значительное улучшение адгезионно-прочностных свойств битумов, т.е. происходило увеличение адгезии до 1, в то время как у исходного образца битума она составляла 4-5 балла. Так же выявлено и улучшение комплекса малакометрических свойства с увеличением вводимого неионогенного ПАВа.

Таким образом, полученные результаты свидетельствует не только о применении правильно выбранных добавок при приготовлении высокодисперсных эмульсий на основе неионогенных ПАВ с повышенной устойчивостью к расслаиванию и коалесценции, но и о высокой механической прочности битумной пленки на поверхности каменного материала, которое необходимо для приготовления качественных дорожных покрытий.

1. Kemalov A.F, Kemalov R.A, Valiev D.Z. Structural dynamic study of roof waterproofing materials // Modern Applied Science. - 2014. - Vol.8. Is.5. - P.115-120.

2. Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф. Использование природных битумов в качестве сырья для получения битумных изоляционных материалов // Нефтяное хозяйство. – 2014. – № 11. С. 140-143.

DOI: 10.17223/9785946218412/527

**ПРИМЕНЕНИЕ СОСТАВОВ КРИОГЕЛЕЙ ДЛЯ УКРЕПЛЕНИЯ ЗАЩИТНОГО
ГЛИНИСТОГО СЛОЯ НА КУРУМНЫХ УЧАСТКАХ МАГИСТРАЛЬНОГО
ГАЗОПРОВОДА «СИЛА СИБИРИ»**

Бурков П.В., Данилов И.Е.

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет», Томск, Россия
burkovpv@tpu.ru*

Освоение природных ресурсов Дальнего Востока и территорий с вечной мерзлотой является одной из первоочередных государственных задач, решение которой осложняется экстремальными климатическими условиями. Нефтехимическая промышленность играет существенную роль в мировой экономике, оказывая значительное влияние на ключевые отрасли промышленности, строительство и сельское хозяйство. В связи с этим, вопросы проектирования и обустройства нефтегазовых месторождений в северных регионах РФ имеют стратегическую значимость.

В местах строительства линейной части магистрального газопровода на участках с курумными слоями с целью перераспределения силовых воздействий на траншею, возникающих при движении толщи пород проектным институтом разработаны мероприятия, предотвращающие сползание курумов с применением метода устройства защитного слоя из глины. Данный метод препятствует тектоническим сдвигам, возникающих на поверхности зеркала скольжения при применении глинистых заполнителей.

Устройство защитного слоя из глины имеет ряд недостатков. Есть вероятность, что период весенней распутицы может негативно повлиять на прочностные и сдерживающие характеристики защитного слоя.

Развитие вышеуказанных природных явлений может привести к пространственной деформации траншеи, что в последствии может влиять на напряженно-деформированное состояние магистрального газопровода. Негативным результатом данных процессов может стать нарушение целостности и уменьшение прочности сварных соединений подземного трубопровода.

Мы предлагаем метод, который подразумевает под собой смешивание защитного слоя из глины с полимерных составов в виде строительного геля (криогеля), который будет способствовать образованию прочной опорной системы, связанного со строительным гелем.

Слой грунта, скрепленный криогелеобразующей композицией, защищает слой грунта от смещений друг относительно друга, а также служит гидроизоляцией в ходе сезонных колебаний температур [1-3]. Практическая значимость работы состоит в том, что применение композиционных материалов на основе криогелей позволит решить важные технические задачи, присутствующие на Крайнем Севере. Методы применения композиционных материалов на основе криогелей, способы их получения и использования являются патентоспособными. Криогель является перспективным материалом для использования в криолитозоне с целью повышения устойчивости и прочности подземных технических сооружений, расположенных в арктической климатической зоне.

1. Лозинский В.И. Криотропное гелеобразование растворов поливинилового спирта// Успехи химии.1998. Т.67.№7.-С.530-538;
2. Лозинский В.И. Криогели на основе природных и синтетических полимеров: получение, свойства и области применения / В.И. Лозинский // Успехи химии. – 2002. - №71. – С. 483-487;
3. Манжай В.Н., Фуфаева М.С. Изготовление криогелей на основе поливинилового спирта как способ рациональной утилизации отработанных масел // Химия и технология топлив масел. 2015. №5. С. 14-16;

DOI: 10.17223/9785946218412/528

ВЛИЯНИЕ ПЕРВИЧНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ НА СОСТАВ И МОЛЕКУЛЯРНУЮ СТРУКТУРУ АСФАЛЬТЕНОВ

^{1,2}Корнеев Д.С., ¹Певнева Г.С., ^{1,2}Головко А.К.

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения Российской академии наук, Томский филиал, Томск, Россия
KorneevDS@ipgg.sbras.ru

Проблемы переработки тяжелых нефтей, связанные с высоким содержанием асфальтенов и особенностями их химической природы, обуславливают необходимость оптимизации существующих технологий и создания новых подходов к облагораживанию тяжелого углеводородного сырья [1]. На сегодняшний день известно, что уже при температурах 100-200 °С молекулы асфальтенов тяжелых нефтей способны разрушаться посредством разрыва ковалентных связей с образованием значительных количеств газа, масел и смол, а их молекулярная структура существенно меняется [2, 3]. Это обуславливает необходимость исследования превращений асфальтенов в процессах первичной переработки нефти для оптимизации существующих технологий.

Целью работы является исследование изменений состава и молекулярной структуры асфальтенов в процессе атмосферно-вакуумной перегонки тяжелой нефти.

Исследование проводилось на примере асфальтенов, выделенных из тяжелой нефти Усинского месторождения (АН), мазута (АМ) и гудрона (АГ) исходной нефти. Нефтяные остатки получены по ГОСТ 11011-85 с использованием АРН-2. Температура кубового остатка в процессе атмосферно-вакуумной перегонки исходной нефти не превышала 290 °С.

По данным таблицы 3 видно, что в процессе первичной переработки тяжелой нефти фактор ароматичности (f_a) асфальтенов увеличивается на 8,2 % отн., а содержание нафтенового (f_n) и парафинового (f_p) углерода в них снижается на 5,7 и 2,5 % отн. соответственно. Это указывает на значительную деструкцию асфальтеновых молекул в процессе первичной переработки тяжелой нефти.

Таблица 1 – Характеристика молекулярной структуры асфальтенов нефти, мазута и гудрона

Параметр	АН	АМ	АГ
f_a	34,0	41,2	42,2
f_n	59,3	53,8	53,6
f_p	6,7	5,0	4,2

Результаты исследования свидетельствуют о том, что инициирование термодеструкции асфальтенов и их активное разрушение происходит на стадии получения мазута. В процессе получения гудрона степень преобразования молекулярной структуры асфальтенов уже не столь существенна, однако общие тенденции изменения их строения сохраняются.

Полученные данные необходимо учитывать при создании ресурсоэффективных способов переработки тяжелых нефтей и природных битумов.

1. Анчита Х. Переработка тяжелой нефти: реакторы и моделирование процессов. – СПб.: Профессия, 2015. – 588 с.
2. Naghizada N., Prado G.H.C., de Klerk A. Uncatalyzed hydrogen transfer during 100-250 °C conversion of asphaltenes // Energy and Fuels. – 2017. – Vol. 31. – No 7. – P. 6800–6811.
3. Korneev D.S., Pevneva G.S., Golovko A.K. Thermal transformations of asphaltenes at a temperature of 120 °C // Journal of Siberian Federal University-Chemistry. – 2019. – Vol. 12. – № 1. – P. 101-117.

DOI: 10.17223/9785946218412/529

ПРЕОБРАЗОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ АСФАЛЬТЕНОВ В ПРОЦЕССЕ ИХ СТУПЕНЧАТОЙ ДЕСТРУКЦИИ ДО 230 °С

¹Чузлов В.А., ^{2,3}Корнеев Д.С., ²Певнева Г.С., ^{2,3}Головко А.К.

¹Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения Российской академии наук, Томский филиал, Томск, Россия
KorneevDS@ipgg.sbras.ru

В связи с вовлечением в хозяйственный оборот тяжелого углеводородного сырья, обогащенного асфальтенами, возникает необходимость создания эффективных способов его переработки [1]. Новые подходы к переработке тяжелых нефтей и природных битумов должны базироваться на исследовании свойств, состава и структуры асфальтенов [2], а также закономерностей их превращений в различных условиях [3].

Целью данной работы является оценка изменения молекулярной структуры асфальтенов в процессе их ступенчатой деструкции до 230 °С.

В качестве объектов исследования использовались асфальтены зюзеевской нефти (АЗН), асфальтены усинской нефти (АУН) и асфальтены кармальского битума (АКБ), различающиеся по распределению атомов углерода в различных структурных фрагментах. Термолиз асфальтенов проводился в токе N₂ последовательно при температурах 120 и 230 °С до полного удаления образующихся продуктов из реакционной зоны.

По данным таблицы 1 видно, что в процессе ступенчатой термодеструкции асфальтены склонны к увеличению фактора ароматичности (f_a) и снижению содержания нафтенового (f_n) и парафинового (f_n) углерода. Следует отметить, что уже при 120 °С наблюдается значительное изменение молекулярной структуры асфальтенов, свидетельствующее о протекании деструктивных процессов.

Таблица 1 – Изменение структуры асфальтенов в процессе ступенчатого термолиза

Параметр	АЗН			АКБ			АУН		
	исх	120 °С	230 °С	исх	120 °С	230 °С	исх	120 °С	230 °С
f_a	32,8	41,8	48,2	26,3	40,1	46,9	34,0	38,6	48,4
f_n	58,7	52,3	47,9	57,5	53,0	48,7	59,3	55,2	46,8
f_n	8,5	5,9	3,9	16,2	6,9	4,4	6,7	6,2	4,8

После термической деструкции при 230 °С все исследуемые асфальтены имеют сходное содержание атомов углерода в различных структурных фрагментах. Таким образом, в процессе термолиза асфальтенов до 230 °С «стираются» различия в их молекулярной структуре независимо от строения исходных асфальтенов.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ в рамках проекта № 18-33-00478.

1. Анчита Х. Переработка тяжелой нефти: реакторы и моделирование процессов. – СПб.: Профессия, 2015. – 588 с.
2. Ганеева Ю.М., Юсупова Т.Н., Романов Г.В. Асфальтеновые наноагрегаты: структура, фазовые превращения, влияние на свойства нефтяных систем // Успехи химии. – 2011. – Т. 80. – № 10. – С. 1034-1050.
3. Kapadia P.R., Kallos M.S., Gates I.D. A review of pyrolysis, aquathermolysis, and oxidation of Athabasca bitumen // Fuel Processing Technology. – 2015. – V. 131. – P. 270-289.

DOI: 10.17223/9785946218412/530

ВЛИЯНИЕ ВЫБРОСОВ НЕФТЕПЕРЕРАБАТЫВАЮЩЕГО ПРЕДПРИЯТИЯ НА СОСТАВ ОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ СНЕЖНОГО И ПОЧВЕННОГО ПОКРОВОВ

Русских И.В., Стрельникова Е.Б., Серебренникова О.В., Кадычагов П.Б.
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
rus@ipc.tsc.ru

Предприятие "Томскнефтепереработка" (ТНП), расположенное в 1.5 км от поселка Семилужки Томской области, в 25 км от Томска и в непосредственной близости от нефтепровода «Транснефть», занимается производством нефтепродуктов. ТНП – современное предприятие, свою первую продукцию выдало в конце 2008 года, продемонстрировав высокий производственный потенциал, который позволил в 2009 году достигнуть перерабатываемой мощности 400 тонн в сутки, предполагается увеличение мощности переработки предприятия до 4 млн. тонн нефти в год [1]. С целью исследования возможного загрязнения окружающей среды продуктами деятельности ТНП были проанализированы пробы снега, отобранные на прилегающей территории. В составе органических соединений, выделенных из талых вод, идентифицированы алканы (Алк) и ароматические углеводороды (АУВ), кислородсодержащие органические соединения, представленные карбоновыми кислотами (КК), альдегидами (Алд) и кетонами (Кет), циклические биомолекулы (ЦБ), включающие токоферолы, стероиды, би-, три- и пентациклические терпеноиды, нефтяные гопаны (НГ), трифенилфосфаты (ТФФ).

Таблица 1 – Состав органических компонентов в снежном покрове территории вокруг ТНП, мкг/дм³

Соединения	200 м на восток	100 м на юг	300 м на запад	Фон, 1,5 км на северо-запад	1,5 км на север, окраина п. Семилужки
АЛК	2,35	2,09	1,4	2,6	3,15
АУВ	0,13	0,11	0,05	0,05	0,1
КК	1,21	1,71	0,86	1,69	2,98
АЛД	0,91	1,74	0,57	1,22	1,22
КЕТ	0,09	0,21	0,07	0,09	0,12
ЦБ	0,25	0,41	0,44	0,29	0,50
НГ	0,02	0,004	0	0,003	0,02
ТФФ	0,08	0,16	0,06	0,05	0,12

Максимальные концентрации Алк, КК, ЦБ, НГ обнаружены в 1,5 км на север от ТНП с подветренной стороны, а Алд, Кет и ТФФ – в 100 м на юге от ТНП. К нефтезагрязняющим компонентам относятся тетра- и пентациклические АУВ, которые являются канцерогенными соединениями и составляют от 31 % (всех АУВ) на окраине п. Семилужки до 76 % в 200 м на востоке от ТНП, а также НГ [2, 3]. Высокая концентрация этих соединений на востоке от ТНП связана с расположением терминала, который осуществляет отгрузку нефтепродуктов, а также с очередями бензовозов.

Подобное распределение загрязнений по точкам отбора проб характерно и для почвы. Количество загрязняющих компонентов в почвенных образцах больше, чем в снеговых.

1. <http://www.ids55.ru/nig/articles/pererabotkauglevodorodov/703-2012-05-02-09-08-41.html> (Дата обращения 14.05.2019)
2. Peters K.E., Walters C.C., Moldowan J.M. The Biomarker Guide: Biomarkers in the Environment and Human History // Cambridge University Press. – 2005. – V. 1. – 492 p.
3. Ильницкий А.П., Королев А.А., Худoley В.В. Канцерогенные вещества в водной среде. – М.: Наука, 1993. – 220 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/531

**СТРАТЕГИЯ ПЕРЕХОДА К ПЕРЕДОВЫМ ЦИФРОВЫМ, ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫМ
ПРОИЗВОДСТВЕННЫМ ТЕХНОЛОГИЯМ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
ПЕРЕРАБОТКИ УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ**

¹Ивашкина Е.Н., ¹Иванчина Э.Д.

¹*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет», Томск, Россия
ivashkinaen@tpu.ru*

Приоритетным направлением фундаментальных исследований в области каталитических процессов является изучение механизма и кинетических закономерностей протекания каталитических реакций в промышленных условиях с привлечением комплекса современных методов исследований, как экспериментальных, так и методов математического моделирования. Интеграция и междисциплинарность являются определяющей тенденцией развития науки и технологий. Основной научно-технической проблемой сегодня является отсутствие теоретических основ создания интеллектуальных систем для оптимизации работы промышленных установок переработки нефти, в основу которых положен механизм и кинетика каталитического превращения углеводородов в процессах глубокой переработки углеводородного сырья, что на сегодняшний день является актуальной, востребованной и междисциплинарной задачей.

В работе показаны основные этапы создания импортозамещающей системы технологического моделирования процессов и аппаратов технологий переработки нефти в моторные топлива и биоразлагаемые поверхностно активные вещества. «Русский Хайсис» будет включать в себя математические модели основных процессов переработки углеводородного сырья, построенные на основе физико-химических закономерностей превращения индивидуальных компонентов, а также учитывающие нестационарность промышленных технологических процессов, вызванную динамическим изменением углеводородного состава перерабатываемого сырья и дезактивацией катализаторов. Внедрение и использование предлагаемой комплексной моделирующей системы на НПЗ позволяет повысить ресурсоэффективность промышленного производства, а также решить проблему запаса по качеству товарной продукции. Методологические основы разработки фундаментальных математических моделей процессов переработки нефтяного сырья созданы для взаимосвязанных технологических процессов – каталитического крекинга, риформинга, алкилирования, изомеризации – важнейших стадий производства компонентов высокооктановых бензинов и дизельного топлива, а также для процессов производства синтетических моющих средств – биоразлагаемых алкилбензосульфонов (ЛАБС) [1–2]. На основе разработанных математических моделей создана интеллектуальная система для управления, оптимизации и прогнозирования работы промышленных установок переработки нефти в высокооктановые бензины, дизельное топливо и ЛАБС.

Таким образом, предложенная стратегия перехода к «Русскому Хайсису» решает научную проблему, соответствующую направлению из Стратегии НТР РФ: Н1 Переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта.

1. Ivanchina, Emiliya, Ivashkina Elena, Dolganova Irena Influence of alkylaromatic hydrocarbons on the efficiency of linear alkylbenzene sulfonic acid synthesis //Chemical Engineering Journal .-2017.-Vol. 329.-P. 250-261 .
2. Ivanchina, Emiliya, Ivashkina Elena, Nazarova Galina Mathematical modelling of catalytic cracking riser reactor // Chemical Engineering Journal .-2017.-Vol. 329.-P. 262-274.

DOI: 10.17223/9785946218412/532

**СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ СЕЛЕКТИВНОГО
ГИДРИРОВАНИЯ ДИЕНОВ В СОСТАВЕ БЕНЗИНА КАТАЛИТИЧЕСКОГО
КРЕКИНГА**

^{1,2}Саломатина А.А., ²Перейма В.Ю., ²Сайко А.В., ²Климов О.В.

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский государственный
технический университет», Новосибирск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт катализа им. Г. К.
Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия
sillyann@mail.ru, viz@catalysis.ru

В настоящее время до 40% от общего количества товарных бензинов приходится на долю бензина каталитического крекинга (БКК) [1]. Помимо высокого содержания олефинов, обуславливающих высокое октановое число, БКК характеризуется также наличием в своем составе серы, содержание которой в товарных топливах жестко регламентируется экологическими стандартами. С целью устранения вышеуказанного недостатка БКК подвергают процессу гидроочистки, на первой стадии которого происходит селективное гидрирование диеновых углеводородов (СГД), а на второй – гидрообессеривание. Необходимость первой стадии обусловлена наличием в составе БКК диенов, имеющих склонность к полимеризации и способствующих закоксовыванию основного катализатора гидроочистки, и, как следствие, снижению срока его эксплуатации. Однако в России процесс СГД БКК осуществляется исключительно с использованием импортных катализаторов.

В данной работе предложен метод приготовления никель-молибденовых катализаторов селективного гидрирования диеновых углеводородов в составе бензина каталитического крекинга и проведено изучение влияния их состава на каталитические характеристики.

В ходе данной работы методом пропитки был приготовлен ряд NiMo/Al₂O₃ катализаторов СГД БКК с различным соотношением Ni/Mo. Приготовленные катализаторы были испытаны в процессе СГД в бензиновой фракции каталитического крекинга (диапазон температур кипения 30-210 °С). Содержание диолефинов в сырье и гидрогенизате определялось методом газовой хроматографии и методом определения диенового числа нефтепродуктов с помощью реакции присоединения малеинового ангидрида (метод UOP 326). Компонентный углеводородный состав сырья и гидрогенизата определялся методом ASTM D6730.

На основании полученных данных можно заключить, что среди протестированных образцов с увеличением соотношения Ni/Mo наблюдается увеличение активности в превращении диенов. Наибольшая активность наблюдается при соотношении Ni/Mo, равном 1,5. В то же время увеличение соотношения активных металлов в условиях проведения испытаний практически не влияет на степень гидрирования моноолефинов а, следовательно, и на октановое число получаемого гидрогенизата. Таким образом, при увеличении соотношения Ni/Mo также отмечено увеличение селективности процесса гидрирования диолефинов в БКК.

Использование катализатора с оптимизированным составом в процессе СГД обеспечивает степень удаления диеновых углеводородов более 85% (снижение диенового числа с 4,3 до 0,6), что позволяет получать продукт, удовлетворяющий требованиям к сырью процесса селективного гидрообессеривания БКК.

1. Brunet S. On the hydrodesulfurization of FCC gasoline: a review / S. Brunet, D. Mey, G. Perot, C. Bouchy, F. Diehl // Applied Catalysis A: General. – 2005. – 278. P. 143-172.

DOI: 10.17223/9785946218412/533

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАБОТЫ УСТАНОВКИ РИФОРМИНГА НА
ПАВЛОДАРСКОМ НПЗ**

¹Дюсова Р.М., ²Сейтенова Г.Ж., ¹Чузлов В.А., ¹Иванчина Э.Д.

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

²Павлодарский государственный университет имени С. Торайгырова, Павлодар, Казахстан

riza92@bk.ru, gaini-chemistry@mail.ru

Прогнозирование процессов является одним из важнейших этапов математического моделирования. Современные Pt-Re-катализаторы позволяют получить высокооктановый катализат с ИОЧ 96-98 при селективности 87-90 % мас. Однако неизбежно возникает вопрос об их стабильности в процессе эксплуатации, которая определяется углеводородным составом перерабатываемого сырья, технологическим режимом и конструкционными особенностями реакторного блока. Физико-химическая модель процесса позволят определять оптимальные технологические условия и углеводородный состав перерабатываемого сырья, обеспечивающие повышение эффективности за счет сбалансированности кислотной и металлической активности катализатора, т. е. осуществлять оптимизацию работы промышленного реактора при различных режимах его эксплуатации.

Таблица 1 – Прогноз на модели работы установки Л-35-11/600 при загрузке катализатора RG-682

Перераб. сырьё т.	496224,00	988974,00	1564074,00
Активность	0,93	0,87	0,80
Температура входа	485,00	491,00	498,00
Степень ароматизации	19,83	19,79	19,91
Ароматика, %вес.	59,25	59,21	59,33
Кокс, %вес.	2,50	4,97	7,89
Расход сырья м3/ч		75,00	
Пар/(Нафт+Аром)		1,36	
н-Пар/и-Пар сырьё		0,98	
Кратн. цирк. м3/м3		1333,30	
Степень изомеризации		49,00	
Октановое число о.ч.и.		96,00	
Число крекинга		1,90	

В настоящее время с этой целью в лучшем случае применяются эмпирические модели. Это не соответствует той огромной проблеме, которую создает дезактивация катализаторов на основе драгметаллов. Прогнозирование скорости дезактивации катализатора в зависимости от режимов его эксплуатации возможно только на основе кинетических закономерностей каталитического процесса. Так, срок окупаемости загрузки нового катализатора риформинга бензинов соизмерим с длительностью сырьевого цикла. Если это преумножить на все установки, то это – миллиардные убытки, что делает дезактивацию катализатора главной проблемой ресурсосбережения.

1. Островский Н.М. Кинетика дезактивации катализаторов: математические модели и их применение. Институт катализа им. Г.К. Борескова. – М: Наука. – 2001 – 333 с.
2. Костенко А.В., Кравцов А.В., Иванчина Э.Д., Полубоярцев Д.С. Оценка технологических параметров Pt-катализаторов риформинга методом математического моделирования // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2005. – 12. – С. 52–55.

DOI: 10.17223/9785946218412/534

**ВЛИЯНИЕ СМОЛ И АСФАЛЬТЕНОВ НА ДЕПАРАФИНИЗАЦИЮ НЕФТЕЙ
СЖИЖЕННЫМ ГАЗОМ**

Можайская М.В., Певнева Г.С., Сурков В.Г., Головки А.К.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
mozhayskaya@ipc.tsc.ru*

В работе проведена очистка нефти сжиженным углеводородным газом от компонентов образующих АСПО. Определены оптимальные режимы депарафинизации нефти. В качестве объекта исследования взята высокопарафинистая нефть (9,3 % мас.) с содержанием смол 1,7 % и асфальтенов 1,2 % мас. Для выявления оптимального соотношения нефть:сжиженный газ выполнены эксперименты при соотношениях объемов загружаемых в реактор нефти и сжиженного газа от 1:1 до 1:5. Температура процесса во всех экспериментах поддерживалась минус 25 °С. Оптимальным выбрано соотношение 1:3, т.к. при соотношениях 1:1 и 1:2 образуются мелкие кристаллы парафина, трудно отделяемые от жидкой фазы, что затрудняет фильтрование. Увеличение расхода сжиженного газа до 1:5 приводит к незначительному увеличению очищенной нефти и является нецелесообразным.

Влияние температуры на качество очистки сырья изучали в интервале от 0 °С до минус 25 °С и при соотношении нефть:сжиженный газ равном 1:3. При температурах 0 и –5 °С образуется трудно фильтруемая мелкодисперсная взвесь, содержащая большое количество низкомолекулярных УВ (до C₁₆). Оптимальной выбрана температура –25 °С. При этой температуре происходит максимальное осаждение высокомолекулярных УВ состава C₁₇-C₅₇.

Для установления влияния состава нефти на осадкообразования в процессе очистки сжиженным газом были проведены эксперименты на нефтях с различным содержанием смол, асфальтенов и твердых парафинов. В высокопарафинистых нефтях их содержание колеблется от 9,3 до 15,1 %, в парафинистых оно составляет 5,0-6,9 % и малопарафинистая нефть содержит 1,7 % мас.

Для оценки влияния содержания смол и асфальтенов на образование осадка в процессе низкотемпературной очистки нефти были использованы соотношения смолы/парафины и асфальтены/парафины. Наибольшее количество осадка выделяется из высокопарафинистых нефтей. В этих нефтях выход осадка снижается при увеличении соотношения смолы/парафины. Вероятно, смолы, являясь естественными поверхностно-активными веществами, замедляют процесс кристаллизации твердых углеводородов. Влияние количества асфальтенов на выход осадка для высокопарафинистых нефтей не прослеживается.

Парафинистые нефти различаются по количеству образовавшихся осадков в 2,5 раза. В обеих нефтях соотношение смолы/парафины, примерно равное и имеет значения 1.2 -1.3. Но эти нефти различаются по соотношению асфальтены/парафины почти в 2 раза.

Количество осадка, выделившегося из малопарафинистой соболиной нефти незначительно (3,9 % мас.) по сравнению с остальными нефтями. В этой нефти количество смол и асфальтенов, приходящееся на единицу массы парафинов, самые высокие среди изученных нефтей - 2.5 и 0.65 соответственно.

Вещественный состав полученных очищенных нефтей и осадков показал, что в процессе очистки сжиженным газом происходит полная деасфальтенизация. Это обусловлено использованием сжиженной пропан-бутановой смеси, в которой асфальтены не растворимы. Около 50 % смол, содержащихся в исходных нефтях, осаждаются с твердыми углеводородами и асфальтенами.

Таким образом, показано, что помимо твердых парафинов на процесс осадкообразования оказывают влияние присутствующих в нефтях смолы и асфальтены: чем выше в изученных нефтях соотношение смолы/парафины и асфальтены/парафины, тем ниже количество выделившегося осадка. Работа выполнена в рамках государственного задания по проекту № НИОКТР АААА-А17-117030310199-1

DOI: 10.17223/9785946218412/535

**ПРОИЗВОДСТВО КОМПОНЕНТОВ ЗИМНЕГО И АРКТИЧЕСКОГО ДИЗЕЛЬНОГО
ТОПЛИВА В ПРОЦЕССЕ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ДЕПАРАФИНИЗАЦИИ**

Быкова В.В., Белинская Н.С.

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет», Томск, Россия
tpr@tpr.ru*

Введение. Для России в связи с особенностями климатических условий и географического положения возникла необходимость в производстве большего объема зимнего и арктического дизельного топлива с улучшенными характеристиками. Была поставлена цель исследовать процесс производства зимнего и арктического дизельного топлива в процессе каталитической депарафинизации. Теория процесса депарафинизации: Основные реакции процесса гидродепарафинизации включают гидрокрекинг длинноцепочечных молекул *n*-парафинов C_{17} - C_{27} и изомеризацию *n*-парафинов C_5 - C_{16} – эти превращения имеют наибольшее значение. Молекулы *n*-парафинов обладают положительными значениями температуры застывания, что неприемлемо для топлива высокого качества. Продуктами процесса являются низкокипящие *n*-парафины C_{10} - C_{13} , углеводороды изостроения, моноциклические ароматические углеводороды [1].

Исследование влияния температуры на процесс каталитической депарафинизации. Исследование влияния температуры показало, что, увеличивая температуру процесса депарафинизации, содержание *n*-парафинов в продукте уменьшается, т.к. скорость процесса увеличивается и большее количество парафинов подвергаются превращению в реакции гидрокрекинга. Предельная температура фильтруемости также снижается, что обусловлено прямопропорциональной зависимостью между количеством *n*-парафинов и предельной температурой фильтруемости.

Исследование влияния состава сырья на процесс каталитической депарафинизации. С увеличением температуры выкипания в разных фракциях сырья содержание *n*-парафинов снижается. Так как содержание *n*-парафинов в продукте уменьшается, то предельная температура фильтруемости продукта будет снижаться.

Исследование влияния активности катализатора на процесс депарафинизации. С увеличением объема переработанного сырья активность катализатора снижается, т.к. содержание кокса на катализаторе увеличивается.

Оптимизация в зависимости от состава сырья и активности катализатора. При уменьшении активности катализатора увеличивается температура процесса депарафинизации, то есть при меньшей активности катализатора необходимо повысить температуру процесса депарафинизации для получения ДТ с требуемой предельной температурой фильтруемости.

Заключение. В результате изучения процесса производства зимнего и арктического дизельного топлива в процессе каталитической депарафинизации было исследовано влияние технологических параметров на данный процесс. В результате работы были подобраны оптимальные температуры процесса каталитической депарафинизации для получения компонента дизельного топлива с предельной температурой фильтруемости -26 °С согласно ГОСТ 32511-2013.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00585 «Исследование физико-химических закономерностей и разработка нестационарной математической модели процесса каталитической депарафинизации средних дистиллятов нефти».

1. Иванчина Э.Д., Белинская Н.С., Францина Е.В., Луценко А.С., Аверьянова Е.В. Влияние кратности циркуляции водородсодержащего газа на активность катализатора депарафинизации // Технологии нефти и газа. – 2018. – № 2 (115). – С. 8-12.

DOI: 10.17223/9785946218412/536

**ЗАКОНОМЕРНОСТИ ВЫЖИГА ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ
УГЛЕВОДОРОДОВ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПОДАЧЕ ВОЗДУХА В РЕАКТОРЫ
КАТАЛИТИЧЕСКОГО РИФОРМИНГА БЕНЗИНОВ**

¹Кокшаров А.Г., ²Чузлов В.А., ²Иванчина Э.Д.

¹ООО «КИНЕФ», 187110, Кириши, Россия

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет», Томск, Россия
koksharov_a@kinef.ru, chuva@tpu.ru

Процесс каталитического риформинга для большинства нефтеперерабатывающих производств России – базовый вариант производства высокооктановых компонентов автомобильных бензинов и ароматических углеводородов. На некоторых производствах мощности по риформированию достигают 17 – 24% от мощности первичной переработки, в среднем по России это значение составляет около 11 %.

При этом непрерывно осуществляется поиск способов интенсификации уже действующих производственных установок. Добиться эффективности протекания промышленного процесса возможно как непрерывным мониторингом технологического режима и обеспечением протекания химических реакций в области допустимого коксообразования по всему объему работающего катализатора, так и реконструкцией технологической схемы реакторного блока. Оба эти варианта являются многофакторной задачей, решить которую наиболее эффективно в условиях действующего производства большой единичной мощности возможно практически только с применением метода математического моделирования.

Быстрая и необратимая дезактивация катализаторов риформинга, платформинга, каткрекинга фракций природных углеводородов приводит к существенному росту затрат на покупку и перегрузку дорогих контактов, особенно в случае катализаторов, содержащих благородные металлы (родий, платина, палладий). При этом с созданием и применением математических моделей, разработанных на основе данных, полученных в лабораторных условиях, для интенсификации и прогнозирования нефтехимических процессов предложено использовать данные, полученные на промышленных установках с учётом специфики технологии данного процесса, конструкции реактора, разнообразия используемого сырья.

Реконструкция установок большой единичной мощности в масштабах промышленного производства и перевод их на работу с непрерывной регенерацией катализатора является неэффективным решением, из-за их удельного объема в прибыли предприятия. Таким образом, актуальным является решение научной задачи повышения эффективности процесса каталитического риформинга бензинов в циркуляционном контуре реактор-регенератор, а эффективность режимов работы вспомогательного оборудования (теплообменники, насосы, компрессоры) зависит от взаимного влияния процессов эксплуатации и регенерации на активность, селективность и стабильность Pt-катализаторов. Разработанный программный модуль «Регенерация» позволяет определить структуру и количество кокса на катализаторе.

Скорость подачи воздуха в реакционную зону при выжиге определяется количеством и составом кокса. Впервые показана минимизация энергетических затрат за счет выбора режима компрессорного оборудования в зависимости от объема и углеводородного состава переработанного сырья.

DOI: 10.17223/9785946218412/537

ВЛИЯНИЕ СООТНОШЕНИЯ КОБАЛЬТА И НИКЕЛЯ В КАТАЛИЗАТОРАХ ГИДРООЧИСТКИ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ УДАЛЕНИЯ СЕРЫ И АЗОТА

^{1,2}Лущикова А.Е., ²Столярова Е.А., ²Климов О.В., ²Герасимов Е.Ю., ²Ларина Т.В., ²Чесалов Ю.А., ²Носков А.С.

¹Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Новосибирск, Россия

²Федеральный исследовательский центр

«Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН», Новосибирск, Россия
lae@catalysis.ru

Гидроочистка является одним из основных процессов нефтепереработки, при котором происходит удаление серо- и азотсодержащих примесей из топлива.

Данная работа направлена на изучение влияния соотношения Co и Ni в триметаллических катализаторах на физико-химические характеристики катализатора и конверсию процессов гидрообессеривания и гидродеазотирования, а также их сравнение с биметаллическими катализаторами.

Носителем являлся γ -Al₂O₃, предварительно приготовленный в виде экструдатов-трилистников диаметром 1,5 мм. На его основе были синтезированы CoNiMoP-катализаторы с различным атомным отношением Co:Ni: 1:0, 3:2, 1:1, 2:3 и 0:1 соответственно.

Удельная поверхность для всех катализаторов близка и в среднем равна 150 м²/г. Также высчитывалась доля эффективного объема пор диаметром 70-130 Å, где согласно литературным данным реакции гидрообессеривания проходят эффективнее всего [1]: для всех образцов она превысила 50%.

Катализаторы в виде фракции 0,5-0,25 мм были предварительно газофазно сульфидированы и испытаны в процессе гидроочистки модельной смеси следующего состава: 2500 ppm серы (дибензотиофен), 200 ppm азота (хинолин), 5 % мас. нафталина в ундекане. Условия проведения испытаний: T=270°C, P= 35 атм., объёмная скорость подачи сырья = 80 ч⁻¹, отношение H₂/сырьё = 500 нм³/м³.

Для определения морфологии частиц активного компонента катализаторов использовались микрофотографии, полученные методом ПЭМВР. Для всех образцов средняя длина частиц составила - 2,3 нм, среднее число слоев в пакете -1,6, среднее число слоев на 100 нм² – 5,5. Методом ПЭМВР влияния соотношения Co и Ni на морфологию не выявлено.

По положению пиков на УФ- и Рамановских спектрах высушенных образцов установлено, что во всех катализаторах Mo находится в гексагональном окружении, Co²⁺ в тетраэдрическом, а Ni²⁺ имеет октаэдрическое окружение, что согласуется с литературными данными [1]. Смещение полос поглощения Co можно связать с взаимным влиянием электронных плотностей Ni и Co друг на друга. Исходя из этого предполагается образование гибридных CoNiMoS-фаз при последующем сульфидировании, подобных приведённым в статье [2].

Хроматографический анализ жидких продуктов показал увеличение конверсии дибензотиофена с увеличением количества Ni в катализаторе, достигая максимального показателя в 35% для CoNi(0:1)MoP/Al₂O₃. Максимальное значение удаления азота в 71% у катализатора CoNi(1:0)MoP/Al₂O₃. Такая разница конверсий серы и азота объясняется конкуренцией процессов гидрообессеривания и гидродеазотирования.

Был проведён расчёт констант скоростей гидрообессеривания дибензотиофена. Также посчитаны значения TOF исходя из результатов ПЭМВР и данных хроматографического анализа. Максимальная константа скорости реакции обессеривания дибензотиофена и максимальное значение TOF принадлежат CoNi(0:1)MoP/Al₂O₃.

1. Lauritsen J.V., Kibsgaard J. et al. Location and coordination of promoter atoms in Co- and Ni-promoted MoS₂-based hydrotreating catalysts // J. Catal. -2007. –V.249 –P.218–231.
2. Badoga S., Ganesan A., Dalai A.K., Chand S./Effect of synthesis technique on the activity of CoNiMo trimetallic catalyst for hydrotreating of heavy gas oil.// Catalysis Today.2017-V. 291. –P. 160-171.

DOI: 10.17223/9785946218412/538

**ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ К ОСАЖДЕНИЮ АСФАЛЬТЕНОВ
ВЫСОКОПАРАФИНИСТОЙ НЕФТИ**

Петренко Т.В., Герасимова Н.Н.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
canc@ipc.tsc.ru*

Асфальтены оказывают существенное влияние на стабильность нефтяной дисперсной системы (НДС). Их осаждение связано с её составом и содержанием дисперсной фазы и дисперсионной среды. Для повышения коллоидной устойчивости нефти и уменьшения негативных последствий, вызванных выпадением асфальтенов, можно использовать природные ингибиторы осаждения, например, нефтяные смолы. Со смолами связана основная масса нефтяных ГАС. Важное место среди них занимают азотсодержащие основания (АО) и кислородсодержащие кислые соединения (КС), проявляющие поверхностно-активные свойства. Особый интерес представляет исследование процессов структурирования асфальтенов высокопарафинистых нефтей. Для них характерно участие в образовании асфальтосмолопарафиновых отложений, снижающих эффективность использования технологического оборудования при добыче, транспорте и переработке нефти.

Гетероатомные соединения высокопарафинистых нефтей отличаются по составу от аналогичных компонентов малопарафинистых нефтей [1]. Среди них преобладают высокомолекулярные соединения с сильно развитым алкильным замещением, а типичные для малопарафинистых нефтей слабоалкилированные высокомолекулярные соединения присутствуют в подчиненном количестве.

В докладе приводятся результаты изучения устойчивости к осаждению асфальтенов высокопарафинистой нефти в присутствии смол, АО и КС.

Для определения агрегативной устойчивости асфальтенов использовали спектрофотометрический метод, позволяющий фиксировать стадию флокуляции асфальтенов по увеличению оптической плотности в видимой области. Измерения осуществляли на спектрофотометре UVIKON–943 с автоматической записью изменения оптической плотности во времени при длине волны 650 нм.

В работе использовали типичную высокопарафинистую малосмолистую (содержание твердых парафинов – 9,2, смол – 6,5, асфальтенов – 1,2 % мас.) нефть. Смолы получали из деасфальтенизированной нефти с помощью метода жидкостно-адсорбционной хроматографии (ЖАХ) на оксиде кремния, после предварительного элюирования компонентов масел. АО извлекали из деасфальтенизированной нефти с привлечением методов осаждения газообразным хлористым водородом, и ЖАХ на оксиде кремния, импрегнированном соляной кислотой; КС выделяли с применением метода ЖАХ на оксиде кремния, импрегнированном щелочью.

На основании результатов исследования устойчивости к осаждению асфальтенов из высокопарафинистой нефти установлено: высокомолекулярные АО с сильно развитым алкильным замещением способствуют выпадению асфальтенов; смолы и КС являются ингибиторами процесса осаждения асфальтенов; ингибирующая способность смол снижается в присутствии избытка АО с сильно развитым алкильным замещением.

1. Аюрова А.М., Герасимова Н.Н. Азотистые основания и кислые соединения в высокопарафинистых нефтях // Труды XX Международного симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых ученых, посвященного 120-летию со дня основания Томского политехнического университета: «Проблемы геологии и освоения недр» – Томск, 04–08 апреля 2016 г. – Томск: Изд-во ТПУ, 2016, Т. II. – С.456–458.

DOI: 10.17223/9785946218412/539

ФРАКЦИОННЫЙ СОСТАВ СЛОЖНЫХ СТРУКТУРНЫХ ЕДИНИЦ НЕФТЕЙ ПРИ ГИДРОТЕРМАЛЬНО-КАТАЛИТИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Салих С.И.Ш., Мухаматдинов И.И.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет
iimuhamatdinov@gmail.com*

Исследованы асфальтены, выделенные из нефти Ашальчинского месторождения и продуктов каталитического акватермолиза в присутствии катализатора и донора водорода методом ступенчатой экстракции. Получены 6 фракций асфальтенов (А1–А5 и карбено-карбоиды). В процессе каталитического акватермолиза наблюдается повышение содержания легких фракций (насыщенные углеводороды) в результате интенсификации деструктивного гидрирования, преимущественно по наименее прочным –С–S–С– связям в молекулах смол и асфальтенов. По результатам исследований обнаружено явление перераспределения между фракциями асфальтенов, экстрагируемыми растворителями различного состава и растворяющей силы, а так же снижение средней молекулярной массы асфальтенов под действием катализатора для каждой из фракций.

В мировой структуре углеводородных ресурсов постоянно увеличивается доля трудноизвлекаемых запасов, к которым в частности относятся высоковязкие нефти (ВВН) и природные битумы (ПБ). Запасы последних в несколько раз превышают запасы легких и маловязких нефтей и являются важнейшей частью сырьевой базы нефтяной отрасли как в России, так и в ряде других нефтедобывающих стран мира. Поэтому разработке залежей таких неконвенциональных ресурсов уделяется все большее внимание. Добыча сырья осложняется большим числом проблем, связанных с высоким содержанием в нем высокомолекулярных углеводородных и гетеросодержащих соединений, такие как асфальтены. Содержание асфальтенов в нефти могут значительно влиять на свойства нефти, что затрудняет процесс добычи, переработки и транспортировки.

Образцы нефти (5-10 г) после предварительной обработки горячим изооктаном (200 мл) на бумажном фильтре, помещенном в экстрактор аппарата Сокслета, последовательно обрабатывали смесями изопропилового спирта и бензола, содержащими 20, 40, 60, 80 % последнего, и чистым бензолом. Данные растворители характеризуются близкими температурами кипения (изопропиловый спирт – 82 °С, бензол – 80 °С) и постепенным увеличением растворяющей силы, причем в отличие от бензола изопропиловый спирт совершенно не растворяет асфальтены. Результаты параллельных разделений одной и той же нефти воспроизводились с относительной ошибкой 10-15 %, т.е. вполне удовлетворительны [1,2].

По результатам ЯМР-спектров, в первую очередь, уменьшается средняя длина цепи (MCL) при каталитическом воздействии в 15 раз у А1, принятой за сольватную оболочку и почти в 13 раз у А2. Происходит разрыв связей С-О и С-S в боковых связях ароматических и алициклических углеводородов, увеличивается содержание (в %) первичного (С_p) и суммы вторичного и четвертичного (С_{sq}) углерода и уменьшается содержание третичного (С_t) и ароматического углерода (С_{ar}).

В работе обнаружено явление перераспределения между фракциями асфальтенов, экстрагируемыми растворителями различного состава и растворяющей силы и снижение средней молекулярной массы асфальтенов для каждой из фракций.

1. Салих И.Ш.С., Мухаматдинов И.И., Гарифуллина Э.И., Вахин А.В. Изучение фракционного состава асфальтенов тяжелого углеводородного сырья // Химия и технология топлив и масел. - 2018. - №1. - С. 29-32.
2. Salih I.Sh.S., Mukhamatdinov I.I., Vakhin A.V., Garifullina E.I. Fractional composition of heavy oil as-phaltenes of Volga-Ural petroleum province // 17th International Multidisciplinary Scientific GeoConference- SGEM 2017. - V. 17. - Is. 15. - PP. 485-492.

DOI: 10.17223/9785946218412/540

КРЕКИНГ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ В ПРИСУТСТВИИ WC/Ni-Cr

Свириденко Н.Н., Головки А.К.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
dark_elf26@mail.ru

Республика Татарстан располагает существенными запасами тяжелых высоковязких нефтей и природных битумов, в том числе, и в районах добычи нефти. Однако несмотря на то, что в распределенном фонде недр Татарстана числятся крупные месторождения высоковязких нефтей, их промышленное освоение идет медленными темпами, а месторождения природных битумов находятся в стадии исследования. Основной причиной этого является – низкая рентабельность их освоения, что обусловлено особенностями их состава и свойств [1].

Тяжелые нефти и природные битумы характеризуются высоким содержанием ароматических углеводородов, смолисто-асфальтеновых веществ, высокой концентрацией металлов и сернистых соединений, высокими значениями плотности и вязкости, повышенной коксуемостью, что приводит к высокой себестоимости добычи, практически невозможной транспортировке по существующим нефтепроводам и нерентабельной, по классическим схемам, нефтепереработке. Снижение эксплуатационных затрат и повышение конкурентоспособности их добычи и переработки может быть достигнуто только за счет применения эффективных технологий, принципиально нового оборудования, мер экономического стимулирования [2]. Цель данной работы – изучить трансформацию смол и асфальтенов тяжелой нефти после проведения каталитического крекинга.

В качестве объекта исследования была выбрана нефть Зюзеевского месторождения. Данный объект является высокосернистым (содержание серы 4,53 %), с высоким содержанием смолисто-асфальтеновых компонентов (31,8 % мас.), атомное отношение Н/С составляет – 1,69. Так же в данном объекте содержится небольшое количество светлых фракций, выкипающих в интервале нк-200 °С и 200-360 °С – 13,5 и 17,3 % соответственно.

В таблице 1 показан состав продуктов крекинга и каткрекинга (0,15 % мас. добавки). Видно, что добавка WC/NiCr способствует более глубокой деструкции высокомолекулярных компонентов нефти, за счет чего выход фракций, выкипающих до 360 °С увеличился на 39,8 % по сравнению с исходной нефтью и на 19,0 % мас. по сравнению с термкрекингом.

Таблица 1. Фракционный и вещественный состав продуктов термо- и каткрекинга нефти, при продолжительности 80 минут и температуре 450 °С

Объект	Содержание, % мас.							
	Жидкость			Газ	«Кокс»	Фракционный		
	Масла	Смолы	Асфальтены			нк-200°С	200-360°С	>360°С
Исх. нефть	68,2	22,5	9,3	0,0	0,0	13,5	17,3	69,2
Крекинг	76,7	10,3	4,6	5,0	3,4	23,0	28,6	40,0
Кат.крекинг	76,5	8,1	3,2	6,9	5,3	34,9	35,7	17,2

Работа выполнена в рамках государственного задания № АААА-А17-117030310199-1

1. Каюкова Г.П. Свойства тяжелых нефтей и битумов пермских отложений Татарстана в природных и техногенных процессах / Петров С.М., Успенский Б.В. – М.: ГЕОС, 2015. – 343 с.
2. Грачёв И.Д. Высоковязкие нефти и природные битумы: проблемы и повышение эффективности разведки и разработки месторождений [Электронный ресурс] // Экологический вестник России: научно-практический журнал. 2013.

DOI: 10.17223/9785946218412/541

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ КРЕКИНГА НА ПРЕВРАЩЕНИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПОНЕНТОВ ВЫКУУМНОГО ОСТАТКА

Свириденко Н.Н., Акимов А.С., Головко А.К.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
dark_elf26@mail.ru*

По мере истощения запасов легких и средних нефтей важным сырьевым источником для удовлетворения растущих потребностей в топливе становятся тяжелые высоковязкие нефти и природные битумы. Мировые ресурсы тяжелых нефтей и природных битумов значительно превышают запасы легких и оцениваются более чем в 810 млрд. т [1]. Большими запасами природных битумов располагают Канада и Венесуэла, значительные запасы также имеют Мексика, США, Россия, Кувейт и Китай. По разным оценкам на территории Российской Федерации сосредоточено от 30 до 75 млрд. т тяжелой нефти и природных битумов [1]. Выработка месторождений легких и средних нефтей делает неизбежным все большее вовлечение в переработку тяжелого нефтяного сырья [2]. Не менее актуальной проблемой в области нефтепереработки является повышение глубины переработки нефти за счет повышения эффективности процессов переработки вторичного нефтяного сырья (мазут, гудрон, крекинг-остатки и т. д.) [2]. Цель данной работы заключалась в изучении трансформации компонентов гудрона в зависимости от условий термического процесса.

В качестве объекта исследования была гудрон, выделенный из нефти Зюзеевского месторождения. Данный гудрон является высокосернистым ($S=6,43\%$), с высоким содержанием смолисто-асфальтеновых компонентов ($68,3\%$ мас.). Коксуемость по Конрадсону составила $24,15\%$. Крекинг проводили при $500\text{ }^\circ\text{C}$ и продолжительности от 5 до 45 минут. В качестве каталитической добавки использовалась WC/NiCr и её количество составило $0,1\%$ мас. Оптимальной продолжительностью, при которой наблюдается высокая деструкция и выход светлых фракций при невысоких выходах побочных продуктов, является 15 минут.

В таблице 1 показан состав продуктов крекинга и каткрекинга гудрона. Видно, что добавка WC/NiCr способствует замедлению образования газообразных продуктов и асфальтенов. За счет этого в составе жидких продуктов при каталитическом крекинге образуется $49,5\%$ мас. фракций, выкипающих до $360\text{ }^\circ\text{C}$, что на $8,4\%$ мас. больше, чем при термкрекинге.

Таблица 1. Фракционный и вещественный состав продуктов термо- и каткрекинга гудрона, при продолжительности 15 минут и температуре $500\text{ }^\circ\text{C}$

Объект	Содержание, % мас.							
	Жидкость			Газ	«Кокс»	Фракционный		
	Масла	Смолы	Асфальтены			нк- $200\text{ }^\circ\text{C}$	$200\text{--}360\text{ }^\circ\text{C}$	$>360\text{ }^\circ\text{C}$
Исх. нефть	41,7	37,8	20,5	0,0	0,0	0,0	0,0	100,0
Крекинг	56,5	9,6	4,3	12,9	16,7	16,3	24,8	29,3
Кат.крекинг	60,3	9,3	3,8	9,6	16,7	19,8	29,7	24,0

Работа выполнена в рамках государственного задания № АААА-А17-117030310199-1

1. Муслимов Р.Х., Романов Г.В., Каюкова Г.П., Юсупова Т.Н., Петров С.М. Перспективы тяжелых нефтей // ЭКО. – 2012. – № 1. – С. 35–40.
2. Капустин В.М., Чернышева Е.А. Современное состояние и перспективы развития процессов переработки тяжелых нефтяных фракций и остатков // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2009. – № 9–10. – С. 20–24. 2.

DOI: 10.17223/9785946218412/542

СОСТАВ ПРОДУКТОВ КРЕКИНГА ОКИСЛЕННЫХ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ КОМПОНЕНТОВ ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ

Иовик Ю.А., Кривцов Е.Б., Головкин А.К.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

jiosephe@gmail.com

Окислительное обессеривание нефтепродуктов основано на модифицировании функциональных групп сернистых соединений. Данный метод характеризуется простотой разделения образующихся полярных производных (сульфонов и сульфоксидов) и углеводородов, в смеси с которыми они находятся [1]. При окислении атома серы C-S связь становится менее прочной и легче поддается деструкции при температурной обработке [2].

В качестве объекта исследования выбран высокосернистый вакуумный газойль (ВГ) Новокуйбышевского НПЗ (содержание серы 2,04 % мас.). Окисление вакуумного газойля проводили смесью пероксида водорода и муравьиной кислоты (продолжительность окисления 90 мин, мольное отношение $H_2O_2:HCOOH = 3:4$, $S_0:H_2O_2 = 1:5$). Водную фазу удаляли декантацией, далее полученные образцы подвергали хроматографическому разделению [3]. Неполярные компоненты (НП) смывались с силикагеля гексаном, концентрат окисленных ароматических и серосодержащих соединений – спирт-бензольной смесью. Крекинг вакуумного газойля и продуктов окисления проводили в среде воздуха при температуре 500 °С, с различной продолжительностью процесса.

Установлено, что раздельная термообработка неполярных (НП) и полярных компонентов (ПП) приводит к получению более качественных, чем при крекинге окисленного вакуумного газойля (ОВГ), продуктов: удается увеличить выход фракций, выкипающих до 200 °С и фракции 200-360 °С на 16 и 30 % отн. соответственно при значительно меньшем газообразовании (таблица 1). Степень удаления серы при этом также выше, чем при крекинге неразделенного окисленного вакуумного газойля (ОВГ) – на 13 % отн. Стоит отметить, что данный результат достигается при вдвое меньшей продолжительности термообработки.

Таблица 1 – Состав продуктов крекинга окисленного вакуумного газойля

Образец	Содержание, % мас.							
	Газ	Жидк / S_0	Кокс	Масла	Смолы	Асф.	Н.К. –200	200 – 360
ВГ	–	100,0 / 2,04	–	91,3	8,6	0,1	отс.	18,51
500 °С, 60 мин								
ОВГ	18,4	79,3 / 0,62	2,3	70,1	7,9	1,3	24,4	29,1
500 °С, 30 мин								
НП	5,6	94,3 / 0,28	0,1	92,3	1,9	0,1	33,7	43,3
ПП	20,5	62,6 / 1,76	16,9	45,7	13,2	3,7	12,5	22,0
Σ с учетом выхода компонента	9,4	86,2 / 0,55	4,4	80,3	4,8	1,0	28,3	37,8

1. Toward near zero-sulfur liquid fuels: a perspective review / В. Pawelec, R.M. Navarro, J.M. Campos-Martin, J.L.G. Fierro // Catalysis Science & Technology. – 2011. – №1. – P. 23–42.
2. Javadli, R. Desulfurization of heavy oil / R. Javadli, A. de Klerk // AppliedPetrochemical Research. – 2012. – Vol. 1. – № 1-4. – P. 3-19.
3. Иовик Ю.А. Особенности окислительного обессеривания вакуумного газойля / Ю.А. Иовик, Е.Б. Кривцов, А.К. Головкин // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов – 2018. – Т. 329. – № 11. – С. 78-79.

DOI: 10.17223/9785946218412/543

ВЛИЯНИЕ ЖИДКОГО *n*-АЛКАНА НА УДАЛЕНИЕ СЕРОВОДОРОДА ИЗ МЕТАНА В БАРЬЕРНОМ РАЗРЯДЕ

Кудряшов С.В., Рябов А.Ю., Очердько А.Н.

*¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
ks@ipc.tsc.ru*

Непрекращающийся рост мирового потребления углеводородных ресурсов, в частности, природных, попутных нефтяных газов, а также биогаза [1], обосновывает поиск новых эффективных методов удаления содержащегося в них сероводорода. В современной промышленности для решения этой задачи преимущественно используются абсорбционные методы и процесс Клауса [2]. При этом необходимость предварительного выделения сероводорода снижает общую эффективность процессов и ограничивает поиск новых способов подготовки углеводородных газов. Это объясняет значительно возросший в последнее десятилетие интерес исследователей к плазмохимическим методам конверсии сероводорода [3], которые позволяют удалять его без применения катализаторов и химических реагентов, в одну стадию при атмосферном давлении и комнатной температуре.

В работе [4] авторами показана принципиальная возможность эффективного удаления сероводорода из метана с образованием высокомолекулярных сераорганических соединений под действием барьерного разряда (БР). Анализ возможного механизма процесса показал, что образование полисульфидных органических соединений происходит на поверхности электродов реактора, а газофазные реакции преимущественно завершаются на стадии образования алкилсульфидов и элементной серы S₂. Ингибирование химических процессов на поверхности электродов реактора позволит управлять направлением реакции и составом конечных продуктов. Ранее авторами было показано [5], что добавка жидких углеводородов в поток углеводородных газов предотвращает протекание химических реакций на поверхности электродов реактора в процессе их превращения в БР.

В настоящей работе исследован процесс удаления сероводорода из метана с добавками жидких *n*-алканов C₆-C₈ в плазме барьерного разряда.

Установлено, что образованию высокомолекулярных полисульфидных соединений способствует недостаток жидкого углеводорода в исходной смеси, тиолы и алкилсульфиды формируются в избытке жидкого углеводорода. На основании предполагаемого механизма превращений предложен способ управления процессом.

Работа выполнена по программе фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, проект V.44.3.1.

1. BP Statistical Review of World Energy. – 2018. URL: <https://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy/downloads.html> (дата обращения 02.04.2019)
2. Yildirim Ö., Kiss A.A., Hüser N., Leßmann K., Kenig E.Y. Reactive absorption in chemical process industry: A review on current activities // Chemical engineering journal. – 2012. – V. 213. – P. 371–391
3. Fridman A. Plasma Chemistry. New York: Cambridge University Press, 2008. – 978 p.
4. Кудряшов С.В., Очердько А.Н., Рябов А.Ю., Кривцова К.Б., Щеголева Г.С. Очистка метана от сероводорода в барьерном разряде // Химия высоких энергий. – 2014. – Т. 48. – № 6. – С. 491-495.
5. Kudryashov S.V., Ochered'ko A.N., Ryabov A.Yu., Shchyogoleva G.S. Oxidation of propylene with oxygen and air in a barrier discharge in the presence of octane // Plasma chemistry and plasma processing. – 2011. – V. 31. – P. 649–661.

DOI: 10.17223/9785946218412/544

**ВЛИЯНИЕ СОСТАВА РЕАКЦИОННОЙ СМЕСИ НА НЕОКИСЛИТЕЛЬНУЮ
КОНВЕРСИЮ МЕТАНА В ПРИСУТСТВИИ ВОДЫ В БАРЬЕРНОМ РАЗРЯДЕ**

Кудряшов С.В., Рябов А.Ю., Очеретько А.Н.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*

ks@ipc.tsc.ru

В последние годы в связи с ростом дефицита легкодоступных нефтяных ресурсов значительно возрос интерес к использованию метана – основного компонента природного газа – не только как топлива, но и в качестве сырья для нефтехимических процессов. Однако до сих пор актуальной задачей разработки эффективной технологии конверсии метана в ценные нефтехимические продукты остаётся преодоление его высокой химической стабильности. Применение низкотемпературной плазмы электрических разрядов, в частности барьерного, для активации химических превращений метана позволяет решить указанную проблему.

Неокислительная конверсия метана, осуществляемая в барьерном разряде (БР) в присутствии воды, ранее предложенная авторами настоящей статьи [1], позволяет получать наряду с водородом газообразные углеводороды и жидкие алканы C_5-C_{10} преимущественно изомерного строения. Пары воды в разрядной зоне реактора подавляют нежелательное образование полимерных отложений на поверхности электродов реактора, способствуя эффективному выводу продуктов из разрядной зоны реактора. Результаты такой обработки метана в плазме БР [1, 2] значительно отличаются от результатов по обработке в низкотемпературной плазме различных разрядов только газообразных углеводородов без добавок [3, 4].

В данной работе изучено влияние состава исходной реакционной смеси на неокислительную конверсию метана с добавкой воды в БР.

Установлено, что повышение объёмного расхода воды с 1,3 до 6 см³/ч не оказывает заметного влияния на конверсию метана, а также на содержание водорода и этана в газообразных продуктах реакции. Наблюдается рост содержания пропана и бутанов, а суммарное содержание этилена и пропилена в продуктах снижается. Увеличение объёмного расхода метана с 5 до 60 см³/мин приводит к снижению конверсии метана с 29,3 до 6,2 об. % и энергозатрат на его превращение с 88,3 до 34,7 эВ/молекула, а также сопровождается снижением скорости образования газообразных алканов и олефинов.

Экспериментальные данные подтверждают полученные ранее с использованием математической модели предположения о механизме и кинетике процесса неокислительной конверсии метана в БР.

Работа выполнена по программе фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, проект V.44.3.1.

1. Kudryashov S.V., Ryabov A.Y., Ochered'ko A.N. Conversion of hydrocarbon gases in dielectric barrier discharge in the presence of water // High energy chemistry. – 2017. – V. 51. – No 2. – P.128–131.
2. Kudryashov S.V., Ryabov A.Y., Ochered'ko A.N. Simulation of the kinetics of methane conversion in the presence of water in a barrier discharge // High energy chemistry. – 2018. – V. 52. – No 2. – P.167–170.
3. Scapinello M., Delikonstantis E., Stefanidis G.D. Direct methane-to-ethylene conversion in a nanosecond pulsed discharge // Fuel. – 2018. – V. 222. – P.705–710.
4. SriBala G., Michiels D., Leys Ch., Geem K.M.V., Marin G.B., Nikiforov A. Methane reforming to valuable products by an atmospheric pressure direct current discharge // Journal of cleaner production. – 2019. – V. 209. – P.655–664.

DOI: 10.17223/9785946218412/545

**ВЛИЯНИЕ ТВЕРДОФАЗНЫХ ДОБАВОК НА ПРЕВРАЩЕНИЯ АСФАЛЬТЕНОВ
ГУДРОНА В УСЛОВИЯХ МЕХАНОХИМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ**

Сурков В.Г., Можайская М.В., Певнева Г.С., Головки А.К.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
sanc@ipc.tsc.ru*

Изучено влияние твердофазных добавок на превращения асфальтенов гудрона при механохимическом воздействии (МО).

МО выделенных из гудрона асфальтенов проводили на установке АГО-2М в среде аргона при 80 °С в течение 30 минут. В качестве твердофазной добавки использовали кварц с размером частиц 3-5 мм и оксид алюминия (γ фаза) с размером частиц 70-100 мкм. Соотношение асфальтены : твердая фаза составляло 1 : 15. Вещественный состав МО образцов определяли общеизвестными методами. Асфальтены, выделенные из исходного гудрона и продуктов механообработки, подвергали структурно-групповому анализу (СГА) по методике ИХН СО РАН.

В процессе МО асфальтенов без твердофазных добавок газообразные продукты не образуются, а продукты МО полностью растворимы в хлороформе. В присутствии твердой фазы – кварца и оксида алюминия - значительная часть механообработанных асфальтенов уплотняется, образуя нерастворимые в хлороформе карбены и карбоиды (\square 58 % мас.). Кроме того МО асфальтенов с добавками приводит к образованию газообразных углеводородов (УВ) и водорода, что является свидетельством деструкции асфальтенов. В присутствии Al_2O_3 интенсивность процесса газообразования выше, чем в присутствии кварца, что очевидно связано с более высокой сорбционной способностью Al_2O_3 .

Растворимые в хлороформе продукты МО асфальтенов содержат 96,1 % мас. асфальтенов, 2,6 % мас. смол и 1,3 % мас. масел, что свидетельствует о частичной деструкции асфальтенов при МО. В растворимых продуктах МО асфальтенов в присутствии кварца снижается содержание асфальтенов (81,8 % мас.) и существенно увеличивается количество смол (15,8 % мас.) по сравнению с МО без добавок. Добавка Al_2O_3 при МО асфальтенов способствует более глубокому протеканию реакций деструкции, о чем свидетельствует снижение на 35 % количества асфальтенов и увеличение содержания смол (19,6 % мас.) и масел (19,0 % мас.) по сравнению с кварцем.

Структурные характеристики асфальтенов исходного и МО гудрона практически идентичны. Средняя молекулярная масса 1283 и 1340 а.е.м., количество структурных блоков 4, содержание углерода в ароматических (13,8 и 14,2), насыщенных (15,2 и 14,8) и алифатических (1,3 и 1,2) структурах. У асфальтенов полученных после МО в присутствии кварца снижается молекулярная масса (834 а.е.м.), снижается количество структурных блоков (2), содержания углерода в ароматических (11,9), насыщенных (11,9) и алифатических (0,9) структурах. Эти данные свидетельствуют о том, что в процессе МО асфальтенов протекают не только реакции конденсации, приводящие к образованию карбенов и карбоидов, но также и реакции деструкции. Структурные характеристики асфальтенов продуктов МО асфальтенов в присутствии Al_2O_3 отличаются от таковых для исходных асфальтенов. Они являются трехблочными, обладают меньшей молекулярной массой (1237 а.е.м.), содержание углерода в ароматических (12,8), насыщенных (14,7) и алифатических (1,2) структурах ниже, чем у исходных асфальтенов. В процессе МО асфальтенов в присутствии Al_2O_3 также как и в присутствии кварца конкурируют реакции конденсации и деструкции. Причем преобладают реакции конденсации о чем свидетельствует высокий выход нерастворимых в хлороформе продуктов – карбенов и карбоидов.

Работа выполнена в рамках государственного задания по проекту № НИОКТР АААА-А17-117030310199-1

DOI: 10.17223/9785946218412/546

ИЗМЕНЕНИЕ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ СМОЛ И АСФАЛЬТЕНОВ ВЫСОКОСЕРНИСТЫХ ГУДРОНОВ В ПРОЦЕССЕ КРЕКИНГА

Гончаров А.В., Кривцов Е.Б., Головко А.К.Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

john@ipc.tsc.ru

В связи с сокращением мировых запасов легких и средних нефтей возрастает потребность глубокой переработки тяжелых нефтяных остатков, таких как мазуты и гудроны. Остаточные нефтяные фракции содержат значительное количество высокомолекулярных соединений – смол и асфальтенов. Исследования химического состава и структуры нефтяных асфальтенов и смол проводятся в течение многих десятилетий. Из-за того, что они являются смесью большого числа близких по составу и свойствам соединений, до сих пор нет единого мнения о том, что представляют собой нефтяные смолы и асфальтены и почему они имеют настолько различные химические и физические свойства [1,2]. Целью данной работы является исследование изменения состава и структуры смол и асфальтенов высокосернистых гудронов в процессе крекинга.

Крекинг гудрона проводился в реакторах объемом 12 см³ при температуре 500 °С, продолжительность составляла от 15 до 60 минут. Вещественный состав гудрона и продуктов крекинга устанавливали по стандартной схеме. Содержание асфальтенов в образце определяли «холодным» методом Гольде. Содержание масел и смол определялось последовательным элюированием на активированном силикагеле АСК: масла – н-гексаном, смолы – этанол-бензольной смесью в объемном отношении 1-1. Молекулярная масса смол и асфальтенов определяли криоскопией в нафталине на разработанном в ИХН СО РАН приборе «Крион». Спектры ПМР снимали на Фурье спектрометре AVANCE-AV-300.

Таблица 1 – Состав продуктов крекинга гудронов

Условия крекинга	Содержание, % мас.		ММ, а.е.м.	Распределение протонов в молекулах асфальтенов, % отн.			
	Асфальтены	Кокс		H _{ar}	H _α	H _β	H _γ
гудрон Омского НПЗ							
Исходный	1,1	0,0	2142	-	-	-	-
500 °С 15 мин	5,2	5,0	604	31,75	29,21	32,06	6,98
500 °С 60 мин	0,7	18,9	514	34,84	27,18	31,71	6,27
гудрон Новокуйбышевского НПЗ							
Исходный	5,7	0,0	718	16,6	24,7	47,6	11,1
500 °С 15 мин	6,2	0,29	761	27,47	30,49	35,72	6,32
500 °С 60 мин	0,8	16,0	635	40,65	24,80	25,61	8,94
гудрон нефти Зюзеевского месторождения							
Исходный	20,5	0,0	1552	11,44	25,40	51,95	11,21
500 °С 15 мин	8,7	17,5	686	28,57	29,71	34,29	7,43
500 °С 60 мин	0,6	37,9	-	40,82	34,69	19,59	4,90

Установлено, что при увеличении продолжительности крекинга содержание асфальтенов в объектах исследования снижается, вследствие их уплотнения с образованием кокса. Снижается молекулярная масса молекул асфальтенов, доля H_{ar} увеличивается, вероятно, вследствие отрыва алкильных заместителей, что согласуется с литературными данными [2]. Разрушение нафтеновых структур в составе молекул асфальтенов подтверждается уменьшением количества H_β в средней молекуле.

1. Кривцов Е.Б. Изменение структуры молекул смол и асфальтенов битума месторождения Баян-Эрхэт в процессе аквагермолиза / Ю.О. Карпов, А.К. Головко // Известия Томского политехнического университета. – 2013. – Т. 322. – № 3. – С. 86-91.

2. Seki H. Structural Change of Petroleum Asphaltenes and Resins by Hydrodemetallization / F. Kumata // Energy & Fuels. – 2000. – Vol. 14. – №5. – P. 980-985.

DOI: 10.17223/9785946218412/547

**ФИТОРЕМЕДИАЦИЯ ВЫЩЕЛОЧЕННОГО ЧЕРНОЗЕМА, ЗАГРЯЗНЕННОГО
УГЛЕВОДОРОДАМИ**

Шаронова Н.Л., Теренжев Д.А., Фосс Л.Е., Синяшин О.Г.
*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр
Российской академии наук», Казань, Россия
presidium@knc.ru*

Нефтяные углеводороды являются одними из наиболее распространенных групп стойких соединений и классифицируются как приоритетные загрязнители окружающей среды [1]. Ежегодные потери нефтяных углеводородов в мире превышают 1,2 млн. тонн [2]. Загрязнение почвы нефтяными углеводородами является одним из основных источников химической деградации, обуславливающей глобальные изменения ее физико-химических и биологических свойств [3]. Суммарная площадь нефтезагрязненных земель в Российской Федерации в 2016 г. составила 6183,574 га, объем поступивших в окружающую среду нефтепродуктов – 10278,858 м³ [4]. Экологически безопасным и экономически выгодным технологическим решением, направленным на интенсификацию разложения углеводородов и восстановление почвенных экосистем, является фиторемедиация [5].

Эксперименты проводили в вегетационном домике при 1 и 3%-ном загрязнении выщелоченного чернозема девонской нефтью, дизельным топливом, керосином, смесью 1-метилнафталина и н-тридекана (массовое соотношение 1:2) при выращивании кукурузы обыкновенной сорта Нур в сосудах Варбурга (5,3 кг почвы). Продолжительность экспериментов составила 50 дней. Повторность опыта трехкратная.

При выращивании кукурузы в загрязненной почве установлено снижение содержания углеводородов в большей степени по сравнению с почвой без растений (эффект фиторемедиации). По интенсивности процесса фиторемедиации углеводородных поллютантов был установлен следующий ряд: дизельное топливо = керосин > девонская нефть > смесь индивидуальных углеводородов. Содержание углеводородов снижалось на 23-98%.

Хроматографический анализ экстрактов надземной и корневой биомассы кукурузы не выявил наличия углеводородов, что свидетельствовало об отсутствии фитоэкстракции поллютантов. На основании микробиологических анализов почвы (численность углеводородоокисляющих микроорганизмов, показатели базального и субстрат индуцированного дыхания), установлено, что в основе фиторемедиации углеводородов лежит процесс стимуляции почвенного микробиоценоза.

1. ATSDR. Total Petroleum Hydrocarbons. Agency for Toxic Substances and Disease Registry, Atlanta, GA, USA. – 2011. – URL: <http://www.atsdr.cdc.gov/ToxProfiles/tp.asp?id=424&tid=75> (дата обращения: 13.06.2019)
2. Schmidt-Etkin D. Spill occurrences: a world overview, in: M. Fingas (Ed.), Oil Spill Science and Technology. – Gulf Professional Publishing, Boston, MA, 2011. – pp. 7–48.
3. Wilton N., Lyon-Marion B.A., Kamat R., McVey K., Pennell K.D., Robbat A.Jr. Remediation of heavy hydrocarbon impacted soil using biopolymer and polystyrene foam beads // Journal of Hazardous Materials. – 2018. – V. 349. P. 153–159.
4. Государственный доклад «О состоянии и об охране окружающей среды Российской Федерации в 2017 году». – М: Минприроды России; НПП «Кадастр», 2018. – 888 с.
5. Dhanwal, P. Recent Advances in Phytoremediation Technology / P. Dhanwal, A. Kumar, Sh. Dudeja [et al.] // Advances in Environmental Biotechnology. – 2017. – P. 227-241.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ.

DOI: 10.17223/9785946218412/548

К ВОПРОСУ О НЕФТЕСОРБЦИИ ВЕРХОВОГО ТОРФА СЕВЕРА РФ

Селянина С.Б., Орлов А.С., Пономарева Т.И., Зубов И.Н.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр комплексного изучения Арктики имени академика Н.П. Лаврова Российской академии наук, Архангельск, Россия

gumin@fciarctic.ru

Значительная часть российских нефтегазовых месторождений сосредоточена на Севере на территориях с высокой степенью заболоченности. Добыча, транспортировка и переработка нефти сопровождаются неизбежным риском разливов и утечек, поэтому нефть и нефтепродукты считаются загрязнителями природных комплексов Арктической зоны.

Особые климатические условия Севера обуславливают специфичность верхового торфа [1]. Это может влиять на его геобарьерные свойства, в частности, на нефтесорбцию. Вместе с тем, эти вопросы изучены преимущественно для торфа южных территорий [2]. Поэтому представляется актуальным изучение нефтесорбции верхового торфа Севера РФ.

В качестве объекта исследования образцы верхового торфа мохового типа отобирали с различных глубин залегания типичного для Прибеломорской провинции Иласского болотного массива. Структурную организацию образцов исследовали микроскопически. Водопоглощение и нефтеемкость верхового торфа измеряли весовым методом [3].

Торфяная залежь достаточно однородна по ботаническому составу. Степень разложения возрастает с глубиной залегания от 0 % до 25 %. В верхних горизонтах залежи сохраняется клеточное строение растительных остатков, а ниже 75 см наблюдается значительное разрушение клеточных структур, что сопровождается уплотнением залежи, увеличением насыпной плотности торфа и снижением водопоглощения. Исследование сорбционной способности торфа по отношению к керасину от глубины залегания показало, что максимальную нефтеемкость (около 10 г/г) проявляет верхний горизонт торфяной залежи. С ростом степени разложения и уплотнением слоев за счет разрушения капиллярно-пористой структуры торфа нефтеемкость постепенно снижается с 8,5 г/г (R=5-10 %) до 4 г/г (R=20-25 %). Во всех случаях нефтеемкость торфа находится на уровне или превышает сорбционную способность промышленных нефтесорбентов.

Применительно к нефтяным фракциям наиболее эффективно происходит связывание более тяжелых малоподвижных фракций нефти, в меньшей степени средних и тяжелых фракций, таких как керосин и дизельное топливо, а также сырой нефти, наименее эффективно связываются легкие и подвижные фракции, например бензин. Анализ полученных данных указывает на то, что процесс иммобилизации торфом нефтепродуктов протекает по механизму физической адсорбции.

Таким образом, можно констатировать высокую нефтеемкость торфа месторождений Прибеломорской провинции. Процесс связывания торфом нефтепродуктов протекает по механизму физической адсорбции.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 18-05-70087.

1. Parfenova L.N., Selyanina S.B., Trufanova M.V., Bogolitsyn K.G., Orlov, A.S., Volkova N.N., Ponomareva T.I., Sokolova, T.V. Influence of climatic and hydrological factors on structure and composition of peat from northern wetland territories with low anthropogenic impact // Science of the Total Environment. – 2016. – № 551–552. – P. 108-115.
2. Чухарева Н.В., Шишмина Л.В. Сравнение сорбционных свойств торфа верхового и низинного типов по отношению к товарной нефти и стабильному газовому конденсату // Химия растительного сырья. – 2012. – № 4 – С. 193-200.
3. Испирян С.Р. Разработка методики комплексной оценки поглощения торфом нефтемаслопродуктов: дис...канд. техн. наук. – Тверь, 2001. – 151 с.

DOI: 10.17223/9785946218412/549

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНО-ГРУППОВОГО СОСТАВА МАСЕЛ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЕЙ РАЗЛИЧНОГО ТИПА

²Рявкина М.К., ¹Корнеев Д.С., ²Бешагина Е.В.,¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Томск, Россия
mari.ryavkina@mail.ru

В настоящее время нефть является самым добываемым полезным ископаемым, а продукты ее переработки применяются во многих промышленных сферах. На сегодняшний день увеличивается добыча тяжелых нефтей, однако малая изученность их компонентов затрудняет поиск способов её глубокой переработки [1]. Стоит отметить, что масла тяжелых нефтей, в сравнении с маслами легких нефтей, имеют в своем составе значительное содержание высокомолекулярных полициклических ароматических соединениями, обогащенных гетероатомами. В связи с этим, изучение состава и структуры масел тяжелых нефтей является актуальным направлением.

Целью работы является исследование структурно-групповых характеристик масел тяжелых нефтей различного типа.

В качестве объектов исследования использовались масла Зюзеевской (МЗН), Русской (МРН) и Усинской нефти (МУН). Средняя молекулярная масса (ММ) масел определялась методом криоскопии в нафталине с концентрацией исследуемых веществ 0,5 % мас.. Спектры ЯМР ¹H получены с использованием Фурье-спектрометра Bruker AVANCE-AV-300. Концентрация масел в растворе CCl₃ составляла 1 % мас.

ММ исследуемых образцов отличаются незначительно, а их значения находятся в диапазоне 325-340 а.е.м. (табл. 1). Максимальной ММ характеризуются МУН, что говорит о большей доле в них высокомолекулярных компонентов по сравнению с МЗН и МРН.

Таблица 1 – Характеристика структурно-группового состава масел тяжелых нефтей

Объект исследования	Содержание атомов водорода в различных структурных фрагментах масел, % отн.				ММ, а.е.м.
	H _{ар}	H _α	H _β	H _γ	
МЗН	3,0	11,5	61,4	24,1	329
МРН	3,1	8,7	58,9	29,2	325
МУН	3,5	10,5	56,0	29,9	340

H_{ар} – доля водорода в ароматических ядрах, H_α – доля водорода в группах CH₃, CH₂ и CH, находящихся в α-положении к ароматическим ядрам и гетерофункциональным группам, H_β – доля водорода в группах CH₂ и CH, находящихся в β-положении к ароматическим ядрам и гетерофункциональным группам, H_γ – количество атомов водорода в терминальных метильных группах

Различия в содержании водорода в ароматических структурах исследуемых масел незначительны и не превышают 0,5 % отн. Однако наиболее высокомолекулярные МУН характеризуются максимальным значением H_{ар}. При этом в составе МУН наименьшее содержание H_β (56,0 % отн.). МЗН имеют наибольшую долю водорода в α- и β-положении (11,5 и 61,4 % отн. соответственно), но наименьшее содержание H_γ (24,1 % отн.), что указывает на наличие более длинных неразветвленных алифатических фрагментов в молекулах МЗН по сравнению с другими объектами. Особенности структуры компонентов МРН является минимальное содержание водорода в α-положении к ароматическим ядрам и функциональным группам, составляющее 8,7 % отн.

1. Вьюков, М. Г. К вопросу о мировых тенденциях в добыче нефти / М. Г. Вьюков // Вопросы отраслевого управления. – 2016. – № 3. – С. 49–59.

DOI: 10.17223/9785946218412/550

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ И ХИМИЗМ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПОНЕНТОВ В ПРОЦЕССЕ ТЕРМОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ ПЕРЕРАБОТКИ¹Акимов А.С., ¹Свириденко Н.Н., ²Алексенко В.О., ²Панин С.В.¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки *Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки *Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*
zerobox70@mail.ru, root@ispms.tomsk.ru

Растущая потребность в моторных топливах стимулирует вовлечение в нефтепереработку тяжелого нативного сырья (тяжелые и сверхтяжелые нефти, природные битумы) и остаточного сырья (остатки от атмосферной и вакуумной перегонки нефтей, вторичных процессов, и т.д.) [1-4]. Особенностью вышеуказанного тяжелого сырья (нативного и остаточного) являются следующие моменты: низкое содержание легких фракций (или их отсутствие), низкое отношение Н:С, повышенное содержание гетероатомных соединений (серо-, азот-, кислородсодержащие структуры и высокомолекулярные соединения – смолы и асфальтены). Асфальтены в условиях термокаталитической переработки склонны к конденсации и образованию кокса и являются главным фактором необратимой дезактивации катализаторов. С учетом последнего факта (необратимой дезактивации катализаторов высокомолекулярными компонентами) поиск новых каталитических систем, лишенных ограничений, характерных для традиционных катализаторов весьма актуальна. В ранних исследованиях [5], была обнаружена каталитическая активность полиоксомолибдатных соединений (молибденовых синей) в процессе переработки тяжелого остаточного сырья. Малый размер частиц (сопоставим с размерами молекул асфальтенов), узкое распределение частиц по размерам – наличие таких свойств у молибденовых синей создает предпосылки для их использования в процессах переработки тяжелых нативного и остаточного сырья.

В этой связи приобретают актуальность исследования, направленные на изучение структурных изменений и химизма термокаталитических превращений высокомолекулярных компонентов (асфальтенов) в условиях процесса переработки тяжелого остаточного сырья с применением молибденовых синей.

Для изучения взаимосвязи «структура-свойства» асфальтенов в данной работе были использованы методы синхронного термического анализа с возможностью масс-спектрометрического анализа газообразных продуктов и рентгеновской дифракции.

1. Хавкин В.А., Гуляева Л.А., Никольшин П.А. Классификация деструктивных процессов переработки нефти // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2019. – № 3. С. 3–6.
2. Мустафин И.А., Абдуллин М.Ф., Судакова О.М., Мустафин А.Г., Галиахметов Р.Н., Валинурова Э.Р. Деструктивное превращение газойля в присутствии наноразмерного катализатора на основе никеля // Нефтехимия. – 2018. – №3. С.275-281.
3. Wang D., Jin L., Li Y., Hu H. Upgrading of heavy oil with chemical looping partial oxidation over M²⁺ doped Fe₂O₃ // Energy Fuels. – 2019. – V.33. P.257-265.
4. Tacheri-Shakib J., Shekarifard A., Naderi H. Heavy crude oil upgrading using nanoparticles by applying electromagnetic technique // Fuel. – 2018. –V.232. P.704-711.
5. Akimov A. S., Morozov M. A., Petrenko T. V., Panin S.V., Vosmerikov A.V. Thermocatalytic transformation of heavy residual feedstock in the presence of polyoxomolybdate compounds // AIP Conference Proceedings. – 2018. – № 2051. P. 020002-4

DOI: 10.17223/9785946218412/551

УВЕЛИЧЕНИЕ ВЫХОДА БЕНЗИНОВОЙ ФРАКЦИИ В ТЕХНОЛОГИИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНГА С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Назарова Г.Ю., Ивашкина Е.Н., Орешина А.А.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Томск, Россия
silko@tpu.ru

Технология каталитического крекинга обеспечивает производство около четверти от мирового бензинового фонда при переработке тяжелого нефтяного сырья. При этом в области высоких температур характерно увеличение скоростей реакций крекинга углеводородов бензиновой фракции в компоненты жирного газа, а также реакций конденсации и коксообразования, в связи с чем, выход бензиновой фракции характеризуется экстремумом. При этом интерес представляет количественное установление данной зависимости в условиях переменного состава сырья, поскольку максимальное количество бензиновой фракции сдвигается по температурной оси в зависимости от его состава.

Учет влияния этих факторов реализован при моделировании путем учета концентраций реагентов, констант скоростей реакций, а также функции дезактивации катализатора, которая рассчитывается в зависимости от содержания кокса и тяжелых металлов [1].

$$dC_i / d\tau = \sum_{j=1}^{20} (\pm A_0 \cdot e^{-k_d \cdot C_k} \cdot (W_j + W_{-j}))$$

где C_i – концентрации i -ой группы углеводородов [2], τ – время контакта, с, A_0 – активность катализатора при минимальном содержании кокса в цикле (регенерированный катализатор), k_d – константа дезактивации, установленная экспериментально, C_k – содержание кокса на катализаторе, мас%, W_j и W_{-j} – скорость химической реакции в прямом и обратном направлениях, моль/(с·м³).

Прогнозные расчеты (рисунок 1) показали, что максимальный теоретический выход бензиновой фракции (60,21 % мас. и 57,9 % мас.) достигнут при температуре 527 °С – при переработке сырья с $C_{НУ}/C_{АУ}=3,2$ ед. и при температуре 532 °С – для сырья с $C_{НУ}/C_{АУ}=1,84$ ед. Активность катализатора при этом снижается на 5,30 и 3,66 % – для сырья с большим содержанием насыщенных углеводородов против 7,96 и 5,56 %.

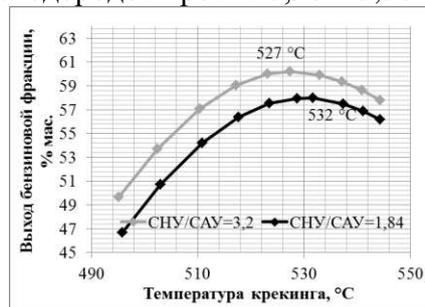


Рисунок 1 – Зависимость выхода бензиновой фракции от температуры крекинга и состава сырья (прогнозный расчет)

Применение модели позволяет не только оценить температуру крекинга необходимую для достижения максимального количества бензиновой фракции, но и прогнозировать режимы каталитического крекинга для обеспечения заданной температуры крекинга

1. Назарова Г.Ю., Ивашкина Е.Н., Иванчина Э.Д., Шафран Т.А., Сейтенова Г.Ж., Бурумбаева Г.Р. Разработка технических решений для увеличения выхода бензиновой фракции и газов в технологии каталитического крекинга вакуумного газойля // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2018. – № 8. – С. 17-24.
2. Ivanchina E., Ivashkina E., Nazarova G., Mathematical modelling of catalytic cracking riser reactor // Chem. Eng. J. – 2017. – 329. P. 262–274.

DOI: 10.17223/9785946218412/552

КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ТИОФЕНА В ПРОЦЕССЕ КРЕКИНГА ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ И ГУДРОНА

Иовик Ю.А., Гончаров А.В., Кривцов Е.Б., Головко А.К.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия*

john@ipc.tsc.ru

Россия занимает одно из первых мест в мире по запасам, добыче и экспорту нефти, находясь при этом на 20-м месте по глубине ее переработки. В настоящее время глубина переработки не превышает 70 %, что ниже значительно ниже значений ряда стран Европы, Северной Америки, Японии [1]. Требования перехода к экологически чистой энергетике и глубокой переработке углеводородного сырья, прописанные в приоритетах научно-технологического развития Российской Федерации, диктуют необходимость создания эффективных технологий облагораживания высококипящих вакуумных дистиллятов и нефтяных остатков. Перспективными являются технологии, позволяющие не только получить дополнительное количество дистиллятных фракций, но и удалить значительную часть неуглеводородных компонентов из состава сырья. Основными способами получения синтетической нефти из тяжелого углеводородного сырья являются различные варианты крекинга. В этих процессах происходит разрушение крупных молекул (асфальтенов, смол, гибридных углеводородов и др.) с образованием широкого набора низкомолекулярных соединений, попадающих в состав новообразованных дистиллятных фракций. При этом структурные фрагменты смол и асфальтенов, содержащие атомы серы, практически не претерпевают изменений, обогащая продукты крекинга производными тиофена. Это приводит к необходимости дальнейшего облагораживания полученных продуктов. Целью данной работы является установление кинетических закономерностей образования производных тиофена в процессе крекинга вакуумного газойля и гудрона.

Крекинг вакуумного газойля и гудрона Новокуйбышевского НПЗ проводили в реакторах-автоклавах объемом 12 см³ при температуре 500 °С, с различной продолжительностью процесса. На основании хроматографических данных по содержанию гомологов тиофена (Т), бензо- и дибензотиофена (БТ и ДБТ) в жидких продуктах крекинга был произведен расчет группового состава СС (ΣТ, ΣБТ, ΣДБТ).

Таблица 1 – Состав сернистых соединений продуктов крекинга

Соединение	Содержание, % мас.				
	гудрон			газойль	
	исходный	крекинг 500 °С, 15 мин	крекинг 500 °С, 60 мин	исходный	крекинг 500 °С, 60 мин
S _{общ} в продуктах	3,04	2,41	2,84	2,04	1,89
ΣТ	0,0	0,28	0,22	0,00	1,77
ΣБТ	0,0	4,90	7,98	0,00	4,87
ΣДБТ	0,0	0,65	0,80	9,23	1,89

Установлено, что термообработка приводит к незначительному уменьшению содержания серы в жидких продуктах крекинга. Происходит образование гомологов Т и БТ, что, вероятно, обусловлено, протеканием реакций деструкции молекул смол и асфальтенов и концентрированием низкомолекулярных серосодержащих фрагментов (новообразованных гомологов Т, БТ и ДБТ) в составе продуктов.

1. А.А. Черепанов, Р.А. Козловский, А.И. Луганский, А.В Горбунов. Термоокислительный крекинг вакуумного газойля // Успехи в химии и химической технологии. – 2015. – Т. XXIX. – № 7. С. 106-107.

DOI: 10.17223/9785946218412/553

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРОКРЕКИНГА НЕФТЯНОГО СЫРЬЯ

Белинская Н.С., Бедарева Е.К., Иванчина Э.Д.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
belinskaya@tpu.ru*

В последние десятилетия наблюдается тенденция истощения запасов легкоизвлекаемой нефти, вследствие чего прирост нефтедобычи обеспечивается за счет тяжелой, трудноизвлекаемой нефти. Тяжелая нефть характеризуется высокой вязкостью и плотностью, высоким содержанием парафинов, смол и асфальтенов, серы и металлов (ванадия, никеля) [1]. Эти факторы значительно усложняют переработку тяжелой нефти в светлые нефтепродукты с высокой добавленной стоимостью и приводит к необходимости введения в эксплуатацию новых и наращивания мощностей имеющихся процессов глубокой переработки нефти, таких как гидрокрекинг и депарафинизация.

Процесс гидрокрекинга позволяет перерабатывать высококипящие фракции (вакуумный газойль, атмосферный остаток) в более ценные продукты (бензин, керосин и малосернистое дизельное топливо).

В нефтепереработке решение задач прогнозирования и оптимизации выхода, состава и свойств получаемых продуктов в зависимости от состава сырья, технологических условий и активности катализатора в условиях нестационарности успешно осуществляется с применением математических моделей, разработанных на физико-химической основе изучаемых процессов [2].

Целью данной работы является разработка подхода к моделированию процесса гидрокрекинга. Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. выявление функции распределения содержания длинноцепочечных n-парафинов в сырьевых и продуктовых фракциях методом газовой хроматографии;

2. выявление функции реакционной способности n-парафинов в реакциях гидрокрекинга в зависимости от числа атомов углерод в молекуле путем расчета значений термодинамической вероятности протекания реакций n-парафинов с различной длиной цепи с использованием квантово-химических методов;

3. выявление функции вероятности разрыва связи в том или ином положении в молекуле n-парафина путем расчета значений термодинамической вероятности разрыва связи в различном положении с использованием квантово-химических методов;

4. разработка уравнений математических моделей процессов гидрокрекинга и депарафинизации, учитывающих реакции, протекающие без участия водорода; реакции, протекающие с участием водорода; реакции гидрокрекинга n-парафинов;

5. выявление полуэмпирических и эмпирических соотношений между составом получаемого дизельного топлива и его низкотемпературными свойствами (зависимость предельной температуры фильтруемости от содержания n-парафинов);

6. разработка алгоритма и компьютерной моделирующей системы для нахождения параметров модели (кинетических параметров, коэффициентов дезактивации) и проведения прогнозных расчетов.

Работа выполнена в рамках государственного задания «Наука», проект № 10.13268.2018/8.9.

1. Яценко И.Г., Полищук Ю.М. Классификация трудноизвлекаемых нефтей и анализ их качественных особенностей // Химия и технология топлив и масел. – 2016. – №4. – С. 50-56.

2. Белинская Н.С., Францина Е.В., Иванчина Э.Д., Луценко А.С., Афанасьева Д.А. Нестационарная математическая модель процесса каталитической депарафинизации дизельных топлив // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2018. – № 12. – С. 25-32.

DOI: 10.17223/9785946218412/554

НОВЫЕ ПОДХОДЫ И ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ПРИРОДНОГО ГАЗА И НЕФТИ В КОМПОНЕНТЫ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ КОМПОНЕНТОВ МОТОРНЫХ ТОПЛИВ

Белый А.С.

*Центр новых химических технологий Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук» (Омский филиал), Омск, Россия
belyi@ihcp.ru*

Рассмотрены проблемы, связанные с существующими в настоящее время тенденциями необходимости увеличения эффективности современных процессов переработки бензиновых фракций (риформинг, изомеризация) при одновременном ужесточении требований к экологической безопасности топлив. Каталитический риформинг бензинов последние 60 лет был, остается в настоящее время и будет в ближайшем будущем одним из основных процессов, обеспечивающим потребности общества в высокооктановых моторных топливах, ароматических углеводородах и водороде. Мощность процесса риформинга в России составляет около 30 млн. тонн в год. В условиях ограниченных запасов нефти задачи рационального использования ценного углеводородного сырья и поиска альтернативных источников приобретают стратегически важное значение. Ключевую роль в решении данных задач играет качество катализатора и, в первую очередь, такие его свойства как селективность катализа целевых реакций и высокую стабильность работы.

В ЦНХТ ИК СО РАН (Омский филиал) разработаны научные основы конструирования катализаторов и технологий переработки компонентов природного газа и нефти в продукты большой химической ценности. Данные технологии внедрены в промышленное производство.

Приводятся данные по промышленному опыту эксплуатации новых катализаторов и промышленных технологий.

DOI: 10.17223/9785946218412/555

ТЕСТИРОВАНИЕ ТОНКОДИСПЕРСНЫХ ПОРОШКОВ ИЗ СПЛАВА ВК6 В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРОВ GTL-ПРОЦЕССА

Пивовар В.А., Попок Е.В., Журавков С.П.

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Томск, Россия
tpr@tpr.ru*

Возрастающий рост мировой промышленности требует всё больше ресурсов. Основным сырьем химической промышленности является нефть, однако её запасы с современными темпами добычи и потребления истощатся в недалеком будущем. В связи с этим перед современной промышленностью уже сейчас стоит вопрос о поиске альтернативного источника сырья. В качестве решения данного вопроса предлагается использование технологии gas-to-liquid (GTL), основанной на синтезе Фишера-Тропша. Данная технология достаточно подробно изучена, и на примере производств в ЮАР, Малайзии и Катаре доказала свою состоятельность [1].

Целью данного исследования является изучение каталитической активности образцов тонкодисперсных порошков, полученных электроимпульсным диспергированием стружки из сплава ВК-6 (94%-карбида вольфрама, 6%-кобальта) в жидкой среде.

Эксперименты проводились на каталитической установке, работающей при повышенном давлении, подробная схема которой представлена в работе [2]. Условия экспериментов: температура в слое катализатора T от 150 до 270 °С, соотношение $H_2:CO = 2:1$, давление P 1 МПа, суммарный расход газов на входе в реактор 120 мл/мин.

При постепенном увеличении температуры от 150 до 270 °С, с шагом 10 °С, проводился анализ содержания углеводородных газов в продуктах синтеза, результаты которого показаны на рисунке 1. Увеличение температуры синтеза выше 250 °С приводит к резкому уменьшению выхода углеводородных газов и увеличению количества диоксида углерода, образующегося по реакции пароводяной конверсии.

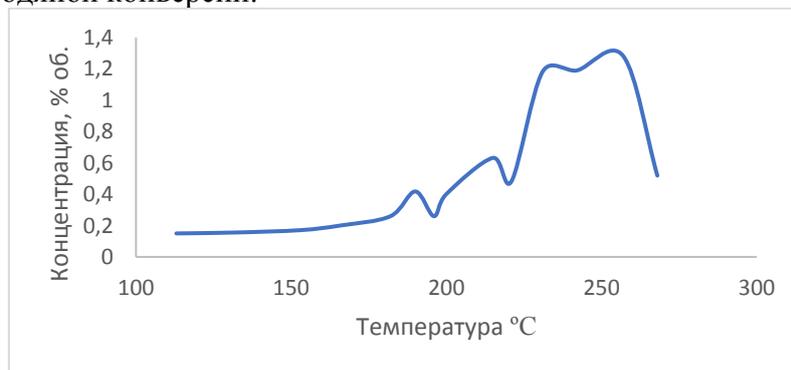


Рисунок 1 – Зависимость выхода газообразных продуктов от температуры синтеза

Жидкие продукты синтеза представляют из себя широкую смесь углеводородов и оксигенатов с содержанием углеводородов с длиной цепочки от 5 до 15 атомов углерода, в данной смеси представлены все классы углеводородов.

Таким образом образец катализатора ВК-6 обладает потенциальной каталитической активностью в синтезе углеводородов из CO и H_2 после соответствующей подготовки.

1. Третьяков В.Ф., Илолов А.М., Будняк А.Д., Французова Н.А., Рагуткин А.В., Латышков А.А., Никоноров С.И. Производство углеводородных топлив на основе альтернативного не нефтяного сырья // НефтеГазоХимия. – 2017. – №3. – С. 35 – 40.
2. Попок Е.В., Levashova A.I., Burlutsky N.P., Khudyakov D.V., Zhuravkov S.P. Ultradispersed electro-explosive iron powders as catalysts for synthesis of liquid hydrocarbons of CO and H_2 // Procedia Chemistry. – 2015 – Vol. 15. – p. 225–230.

DOI: 10.17223/9785946218412/556

ОСОБЕННОСТИ БИОДЕСТРУКЦИИ РАЗЛИЧНЫХ КЛАССОВ УГЛЕВОДОРОДОВ
В НЕФТЕЗАГРЯЗНЕННЫХ БИОЦЕНОЗАХ МОНГОЛИИ

Сваровская Л.И., Алтунина Л.К., Яценко И.Г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти
Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия
sli@ipc.tsc.ru

По объему запасов нефти Монголия занимает 33-е место среди нефтедобывающих стран мира. С развитием нефтедобывающей отрасли уровень загрязненных участков и количество нефтешламных отстойников на территории нефтедобычи увеличивается, что несет угрозу загрязнения водных объектов и распространения на сопредельные участки.

На территории месторождения Цаган-Элс (Монголия) проведен отбор образцов сырой нефти и нефтезагрязненной почвы для моделирования процессов биодеструкции углеводородов. Нефть месторождения Цаган-Элс – вязкая, смолистая, богатая парафиновыми и бедная ароматическими углеводородами. Культивирование нефтезагрязненной почвы проводили в открытой среде в течение 30 суток. В качестве стимулирующего агента применяли раствор нефтewытесняющей композиции ИХН-КА, содержащей минеральный азотистый субстрат и поверхностно-активные вещества (ПАВ). Концентрация нефти, загрязняющей почву, составила 72 г/кг, нефтешлам – 56 г/кг. Численность почвенной микрофлоры не превышала 540 тыс КОЕ/г. С применением раствора композиции ИХН-КА численность микроорганизмов в составе загрязненной почвы и нефтешлама увеличилась на 3 порядка. Увеличение численности микрофлоры стимулирует их ферментативную активность и процессы окисления углеводородов.

Как следует из анализа полученных данных, биодegradация влияет на физико-химические свойства, приводит к формированию более тяжелых нефтей, повышает вязкость и плотность. При биодеструкции углеводородов нефти в первую очередь происходит утилизация масел (уменьшение на 20 % за 30 суток). Как показал ИК-спектрометрический анализ, в процессе биодegradации увеличивается содержание аренов, дальнейшее окисление которых влечет за собой накопление смолисто-асфальтеновых веществ. Анализ сырых и биодegradированных нефтей методом ГХ-МС позволил рассчитать изменение содержания группового состава (рис. 1).

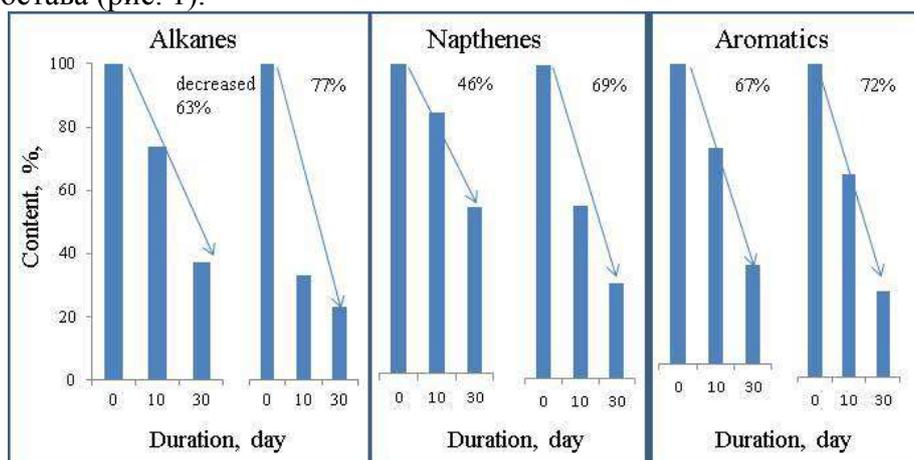


Рисунок 1 – Групповой состав нефтей, экстрагированных из загрязненной почвы и нефтешлама, после 10 и 30 суток биодegradации

Ферментативная дegradация алканов загрязняющей нефти для почвы и нефтешлама после биодegradации с применением стимулирующего субстрата составила 63-77 %, нафтенов – 46-69 %, ароматических углеводородов – 67-72 % соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта № V.46.1.2, выполняемого в рамках Государственного задания.

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

The Role of Acide-Base Properties of Nanoparticles in Cancer Cells Viability Lozhkomoev A.S.	5
Anticancer Activity of Crumpled Aluminum Nanosheets Through Disruption of Ion Balance in Tumor Microenvironment Mikhaylov G., Lerner M.I., Tsukanov A.A., Lozhkomoev A.S., Gutmanas E., Gotman I., Bratovs A., Turk V., Turk B., Psakhie S.G., Vasiljeva O.	6
Physical Mechanical Properties and Multilayer Hierarchically Organized Structure of Ti-Ta-Based Surface Alloy Synthesized on the Niti Substrate by High Current Pulsed Electron Beam D'yachenko F.A., Meisner S.N., Yakovlev E.V., Semin V.O., Meisner L.L.	8
The Double Degree Master Program in Engineering Science (DDMPES) Between the Polytechnic Universities of Tomsk and Berlin Willert E.	10
Mechanics of Adhesive Contacts: Experiment and Theory Lyashenko I.A., Popov V.L.	11
Formation of Hierarchically Organized Aluminum Hydroxides During Water Oxidation of Al Nanoparticles and Their interaction with Bioobjects Lozhkomoev A.S., Kazantsev S.O., Bakina O.V.	13
Bio – Inorganic Interfaces: From Simulations to Applications Tsukanov A.A., Psakhie S.G.	14
Different Fault Slip Modes - Governing, Evolution and Transformation Kocharyan G.G., Ostapchuk A.A., Pavlov D.V.	16
Computer Simulation of the Synthesis of Composite Materials of Medical Application with the Required Structural and Mechanical Characteristics Tovpinets A.O., Leitsin V.N., Dmitrieva M.A.	18
Multiscale Modeling the Mechanical Behavior of Bioinert Ti-Nb Alloys Skripnyak N.V., Skripnyak E.G., Skripnyak V.A.	19
Electron Beam Additive Manufacturing of Metal Products as a Process of Nonstationary Metallurgy: Materials and Features Kalashnikov K.N., Kolubaev E.A.	21
Structure Formation During Adhesive Interaction Under Friction Stir Welding Conditions Kolubaev E.A., Kalashnikova T.A.	22
On Nonlinear Dynamics of Biological Systems in the Presence of Microgravity Naimark O.B.	23
Modeling Static Thermography of Cancer Breast by Using Nondimensional Steady-State Pennes Equation Rogotnev A.A., Nikitiuk A.S., Naimark O.B.	24
Multilayer Modelling of Lubricated Contacts - a New Approach Based on a Potential Field Description Scholle M., Gaskell P.H., Marner F.	25
Differentiation of Breast Normal and Cancer Cells by Laser Interference Microscopy Nikitiuk A.S., Voronina A.O., Beloglazova Yu.A., Khmurchik M.V., Grishko V.V., Naimark O.B.	27
Adhesive Contribution to Friction Popov V.L.	28
Structure and Tribomechanical Properties of Extrudable Ultra-High Molecular Weight Polyethylene Composites Fabricated by 3D-Printing Panin S.V., Buslovich D.G., Kornienko L.A., Dontsov Yu.V., Bochkareva S.A.	30
Active Bio Contact Mechanics: Concepts of Active Control of Wear and Growth of the Cartilage in Natural Joints Popov V.L.	31

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**Секция 1. Основные принципы и методология
физической мезомеханики материалов с иерархической структурой**

Новая технология дисперсного армирования гетерогенных материалов как новая задача перколяционной теории	
Гергега А.Н., Крывченко Ю.В.	36
Критические размеры зерен мезоуровня	
Конева Н.А., Тришкина Л.И., Попова Н.А., Черкасова Т.В.	38
Иерархическая организация структур не кристаллических материалов	
Семухин Б.С., Вотинов А.В.	40
Теоретико-полевое описание флуктуирующих полей деформаций в поликристаллических материалах	
Ташкинов А.А., Шавшуков В.Е.	41
Об особенностях деформирования трабекулярной костной ткани	
Зайцев Д.В., Гилев М.В., Измоденова М.Ю.	43
Эволюция от микро-, к мезо- и макроскопическому масштабному уровню усталости металлов	
Шанявский А.А., Солдатенков А.П.	44
Фрактальная размерность поверхности разрушения пористого $ZrO_2 - MgO$	
Буяков А.С., Зенкина Ю.А., Буякова С.П., Кульков С.Н.	46
Недислокационные механизмы деформации в зонах локализации упругих и пластических дисторсий при пластической деформации никеля на наковальнях Бриджмена	
Тюменцев А.Н., Дитенберг И.А., Суханов И.И.	47
Моделирование фрикционного износа полимерных композиционных материалов с учетом структурных элементов	
Бочкарева С.А., Гришаева Н.Ю., Люкшин Б.А., Люкшин П.А., Панин С.В., Артемов И.Л.	49
Оценка эффективных свойств композита с неоднородной матрицей	
Анисимова М.А., Князева А.Г.	51
Влияние высокоинтенсивных воздействий на структуру и усталостную долговечность титанового сплава ВТ6 и его сварного соединения	
Смирнова А.С., Почивалов Ю.И., Панин В.Е., Насоновская А.В., Маликов А.Г., Оришич А.М.	52
К объединенному квантованному и механическому описаниям макрополосы локализованной деформации Чернова-Людерса	
Решетняк А.А., Шилько Е.В., Шаркеев Ю.П.	54
Экспериментальное и теоретическое исследование накопления необратимых повреждений в АМГ-6 в процессе гигацикловой усталости	
Банников М.В., Биалов Д.А., Оборин В.А., Наймарк О.Б.	57
Исследование неупругих свойств пород при гидроразрыве	
Тримонова М.А., Фасхеев И.О.	59

**Секция 2. Неустойчивость и локализация деформации и разрушения
в материалах с иерархической структурой**

Деформационное поведение рения при комнатной температуре	
Панфилов П.Е., Горностырев Ю.Н.	61
Автоволны локализованной пластической деформации в условиях сверхэластичности	
Данилов В.И., Орлова Д.В., Горбатенко В.В., Данилова Л.В.	62
Влияние частиц и температуры на механизмы пластической деформации монокристаллов высокоэнтропийных сплавов	
Киреева И.В., Чумляков Ю.И., Победенная З.В., Выродова А.В., Куксгаузен И.В., Поклонов В.В., Куксгаузен Д.А.	64

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Автоволновая механика пластичности Зуев Л.Б.	65
Корреляции характеристик автоволн локализованной пластической деформации металлов и параметров межатомных взаимодействий Зуев Л.Б., Баранникова С.А., Жармухамбетова А.М.	67
Влияние механической обработки на структуру частиц алюминия в планетарной мельнице Видюк Т.М., Чесноков А.Е., Смирнов А.В.	68
Происхождение многоуровневых пространственно-временных структур в твердых телах при деформации Хон Ю.А., Zapolsky H., Каминский П.П.	70
Transformations of Kimberlite Minerals and Natural Diamonds Structure as the Result of Pulsed Electromagnetic Irradiation Anashkina N.E., Bunin I.Zh.	71
Прочность текстильных нитей с учетом их иерархической структуры Султанов К.С., Исмоилова С.И., Туланов Ш.Э.	73
Влияние циклического нагружения на структуру и механические свойства конструкционной стали Надежкин М.В., Зуев Л.Б., Шляхова Г.В., Бочкарёва А.В., Полякова Е.С.	75
Качество обработки резанием меди М1 в крупнокристаллическом и ультрамелкозернистом состоянии Филиппов А.В., Шамарин Н.Н., Тарасов С.Ю., Подгорных О.А.	76
Влияние структурного состояния меди М1 на микрогеометрию поверхности при фрезеровании Филиппов А.В., Шамарин Н.Н., Тарасов С.Ю., Подгорных О.А.	77
Повышенеи качества точения лауни Л63 путем формирования объемной ультрамелкозернистой структуры Филиппов А.В., Шамарин Н.Н., Тарасов С.Ю., Подгорных О.А.	78
Effect of the Strain Rate on the Low Cycle Fatigue Behavior of a 10Cr-2W-Mo-3Co-NbV Steel at Room Temperature Mishnev R., Dudova N., Kaibyshev R.	79
Деформация и разрушение образцов доэвтектического силумина с модифицированной интенсивным импульсным электронным пучком поверхностью Иванов Ю.Ф., Клопотов А.А., Устинов А.М., Петрикова Е.А., Тересов А.Д., Рыгина М.Е., Абзаев Ю.А., Волокитин О.Г., Власов Ю.А.	80
Теоретическое исследование особенностей неравновесных границ зерен дисклинационного типа в нанокристаллических материалах Зайцев Д.С., Суханов И.И., Дитенберг И.А.	81
Моделирование процессов деформации преград из монокристаллического сплава ВЖМ8 при ударных нагрузках Туч Е.В., Майер Я.В.	82
Применение деформационного критерия разрушения для моделирования разрушения преграды из сплава д16 при динамическом нагружении Туч Е.В., Стребкова Е.А.	83
Варианты разложения тензоров полных напряжений при моделировании процессов упругопластического деформирования ауксетичных сред с кубической симметрией свойств Кривошеина М.Н., Туч Е.В., Кобенко С.В.	84
Распространение продольных и стержневых волн в цилиндрах из поликристаллических и монокристаллических материалов при динамической нагрузке Кривошеина М.Н., Туч Е.В.	85
Оценка модуля упругости горных пород при одноосном растяжении по данным бразильского теста Цой П.А., Усольцева О.М.	86
Свойства, структура и макролокализация пластического течения в высокопрочной стали с деформационным фазовым превращением Орлова Д.В., Данилов В.И., Горбатенко В.В., Данилова Л.В., Шляхова Г.В., Зуев Л.Б.	88
Энергетический анализ разрушения пластичных тел с трещинами Дерюгин Е.Е.	90

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Влияние кристаллографической ориентации монокристаллов стали гадфильда на трибологические характеристики и деформацию Лычагин Д.В., Филиппов А.В., Новицкая О.С.	92
Эволюция микроструктуры дисперсно-упрочненного сплава V–Cr–W–ZrO₂ при деформации кручением под давлением Смирнов И.В., Гриняев К.В., Тюменцев А.Н., Чернов В.М., Дитенберг И.А.	93
Исследование механических и микроструктурных аспектов локализации пластического сдвига при различных видах динамического нагружения Соковилов М.А., Симонов М.Ю., Чудинов В.В., Оборин В.А., Наймарк О.Б.	94
Effect of Short-Term Aging on the Impact Toughness of Advanced 10% Cr Steel Mishnev R., Dudova N., Kaibyshev R.	96
Особенности дефектной субструктуры в зонах локализации квазивязкой моды деформации Суханов И.И., Тюменцев А.Н.	97
Исследование прочностных характеристик zta композитов при усталостном нагружении Коробенков М.В., Левков Р.В., Нарикович А.С., Киселева Т.А., Снигирев А.А.	98
Деформирование образцов алевролита с нарушениями сплошности при трехстадийном прямом сдвиге Усольцева О.М., Цой П.А., Семенов В.Н.	99
Картины локализации пластической деформации при растяжении в монокристаллах стали гадфильда при пониженной температуре Колосов С.В., Баранникова С.А., Зуев Л.Б.	101
Влияние легирования ванадием на фазовый состав и микротвердость стали с высокой концентрацией атомов внедрения после кручения под высоким давлением Майер Г.Г., Москвина В.А., Астафурова Е.Г.	102
Закономерности накопления и диссипации энергии в процессе пластической деформации сплавов VT1-0 и Zr-1Nb в крупнокристаллическом и ультрамелкозернистом состояниях Шаркеев Ю.П., Легостаева Е.В., Вавилов В.П., Скрипняк В.А., Белявская О.А., Чулков А.О., Козулин А.А., Скрипняк В.В., Ерошенко А.Ю.	103
Влияние ионно-плазменной обработки на микромеханические характеристики композиционных слоев аустенитной нержавеющей стали с разным размером зерна Москвина В.А., Астафурова Е.Г., Рамазанов К.Н., Майер Г.Г., Астафуров С.В., Мельников Е.В., Панченко М.Ю., Загибалова Е.А.	104
Выявление организации пластической деформации в зависимости от кристаллографического направления на основе исследования деформационного поведения монокристаллов сплава Cu-1,5Co-3Al при трении скольжения Княжев Е.О., Калашникова Т.А., Чумаевский А.В.	106
Проверка справедливости закона пэриса для предсказания роста трещины при гигацикловой усталости Баяндин С.Р.	108
Влияние структуры сплава втб на его механические характеристики и пластическую деформацию в процессе скретч-тестирования Шугуров А.Р., Казаченок М.С., Мартынов С.А., Кастеров А.М.	110
Широкодиапазонные определяющие соотношения для описания деформационного поведения металлов и сплавов Билалов Д.А., Баяндин Ю.В., Наймарк О.Б.	112
Механизмы разрушения мезоуровня металлокерамического композита TiNi-TiB₂ Макаров П.В., Бакеев Р.А., Промахов В.В., Жуков А.С.	114
Влияние фазового состава Al-Mg сплавов на характер распространения деформационной полосы Юзбекова Д.Ю., Борисова Ю.И., Могучева А.А.	115
Влияние ИПД на проявление эффекта ПЛШ в AlMgMnZr сплаве Борисова Ю.И., Юзбекова Д.Ю., Могучева А.А.	117
Долговечность алюминиевых и титановых сплавов при комбинированном ударно-волновом и последующем гигацикловом нагружении Оборин В.А., Соковилов М.А., Наймарк О.Б.	118
Особенности проявления мезоскопического структурного уровня на поверхности длинного стального стержня. метод корреляции цифровых изображений Пляскин А.С., Клопотов А.А., Потехаев А.И., Кошко Б.О., Волокитин О.Г., Власов Ю.А.	119

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Моделирование повреждаемости титановых сплавов в широком диапазоне скоростей деформации Скрипняк В.В., Скрипняк Н.В., Козулин А.А., Скрипняк Е.Г., Скрипняк В.А.	121
Вероятностный подход при численном моделировании динамического разрушения Пашков С.В., Зелепугин С.А., Янов Д.В.	122
Исследование структурной неоднородности слоев биметалла Ли Ю.В., Баранникова С.А., Шляхова Г.В., Зуев Л.Б.	124
Исследование деформационного рельефа в керамике $ZrO_2(Y_2O_3)$ методами атомно-силовой микроскопии Шляхова Г.В., Саблина Т.Ю., Севостьянова И.Н., Зуев Л.Б., Кульков С.Н.	125
Исследование неоднородности деформации керамики $ZrO_2 (Y_2O_3)$ при растяжении Саблина Т.Ю., Севостьянова И.Н., Горбатенко В.В., Рьжова Л.Н., Молчунова Л.М., Кульков С.Н.	126
Влияние микроструктуры на износостойкость бериллиевой бронзы Сизова О.В., Колубаев А.В., Филиппов А.В., Терюкалова Н.В., Денисова Ю.А.	127
Эволюция деформационных структур на этапе формирования усталостной трещины в соединениях нержавеющей стали, выполненных роликовой сваркой Кибиткин В.В., Солодушкин А.И., Плешанов В.С., Гнусов С.Ф., Хатьков Д.Н.	129
Реализация механизма Кука-Гордона в $Y-TZP$ керамике Буякова С.П., Буяков А.С., Кульков С.Н.	130
Механизмы деформации аустенитной нержавеющей стали при холодной прокатке Сурикова Н.С., Панин В.Е., Наркевич Н.А., Власов И.В., Гордиенко А.И., Волочаев М.Н.	132
Исследование влияния циклического нагружения на структуру и механические свойства низкоуглеродистой стали Надежкин М.В., Зуев Л.Б., Шляхова Г.В., Бочкарёва А.В., Полякова Е.С.	134
Численный анализ влияния текстуры на эволюцию деформационного рельефа и локализацию пластической деформации в поликристаллическом титане Емельянова Е.С., Романова В.А., Балохонов Р.Р., Сергеев М.В.	135
Микромеханическая модель деформационного поведения аддитивных алюминиевых сплавов Романова В.А., Балохонов Р.Р., Емельянова Е.С., Зиновьева О.С., Зиновьев А.В., Плошихин В.	136
Criterion of Interfacial Bridged Cracks Initiation and Quasistatic Growth Mikhail Perelmuter	137
Особенности деформации и разрушения пористой корундовой керамики с пространственной блочной структурой Григорьев М.В., Кульков С.Н.	139
Циклическое сжатие с возрастающей нагрузкой корундовой керамики с пространственной блочной структурой Григорьев М.В., Кульков С.Н.	140
In-situ изучение эволюции механических повреждений сегментированной керамики, методом КЦИ Григорьев М.В., Утяганова В.Р.	141
Структурные особенности пористой керамики полученной при разных температурах спекания Кульков А.С., Смолин И.Ю., Микушина В.А.	142
Деформация УМЗ меди М1 при наноиндентировании Филиппов А.В., Тарасов С.Ю.	143
Спекл-структура поверхностного слоя образцов сплавов ВТ1-0 и Zr-1Nb в и микро- и ультрамелкозернистом состоянии при деформации Шаркеев Ю.П., Клопотов А.А., Потекаев А.И., Устинов А.М., Ерошенко А.Ю., Легостаева Е.В., Белявская О.А.	144
Изучение процесса деформации и разрушения керамики на основе оксида алюминия методом корреляции цифровых изображений Савченко Н.Л., Кибитки В.В., Григорьев М.В.	146
Энергетический анализ разрушения пластичных тел с трещинами Дерюгин Е.Е.	147
Влияние отжига на температуры и последовательность мартенситных превращений в наводороженных образцах никелида титана с нанокристаллической структурой Батурин А.А., Лотков А.И., Гришков В.Н., Родионов И.С.	149
Водород в никелиде титана: диффузия, влияние на мартенситные превращения и неупругие свойства Лотков А.И., Батурин А.А., Гришков В.Н., Родионов И.С.	150

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Autowave and Acoustic Characteristics of Low-Carbon Steel 1008 At Loading Orlova D., Lunev A., Zuev L.	151
Развитие обратимой неупругой деформации в двойном сплаве на основе TiNi при изотермическом механоциклировании изгибом образцов в В2 фазе Тимкин В.Н., Гришков В.Н., Лотков А.И., Жапова Д.Ю.	152
Влияние ркуп на механические свойства алюминиевого сплава 6063 при индентировании и царапании Филиппов А.В., Тарасов С.Ю.	154
Формирование вакуумно-плазменных покрытий на титановых сплавах с умз структурой для защиты от водорода Лотков А.И., Латушкина С.Д., Копылов В.И., Батурин А.А., Гришков В.Н., Родионов И.С., Тимкин В.Н.	156
Effect of Pre-Strain Rolling Path on Abnormal Grain Growth in Friction-Stir Welded Al-Mg-Si Alloy Kalinenko A., Vysotskiy I., Malopheyeve S., Mironov S., Kaibyshev R.	157
Структура и фазовый состав сплава Ti-6Al-4V, изготовленного методом аддитивной технологии Савченко Н.Л.	158
Модификация столбчатой структуры сплава Ti-6Al-4V при аддитивной проволоочной электронно-лучевой технологии Савченко Н.Л.	159
Трибологическое поведение керамики на основе диоксида циркония при сухом скольжении по стали Савченко Н.Л.	160
Структурные особенности поверхности трения керамики $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$ после высокоскоростного скольжения по стали Савченко Н.Л.	161
Влияние технологических факторов на химический состав и структуру кобальтовых покрытий, полученных с использованием вакуумной электронно-лучевой технологии Гальченко Н.К., Колесникова К.А., Раскошный С.Ю.	162
Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой	
О компьютерном моделировании термомеханического износа огнеупорных материалов Заболотский А.В., Турчин М.Ю., Хадыев В.Т., Мигашкин А.О.	165
Computer Simulation of Quantum Technologies: A_2 ($\text{A} = \text{C}, \text{Si}, \text{N}, \text{P}, \text{O}, \text{S}$) Dimmer Sensors Based on Single-Wall Carbon Nanotubes Maslova O.A., Beznosyuk S.A., Masalimov A.S.	167
Напряженно-деформированное состояние кости средней фаланги пальца руки Чайковская Т.В., Кульков С.Н.	169
Устойчивость термобарьерного покрытия при интенсивном тепловом воздействии Люкшин П.А., Панин С.В., Люкшин Б.А., Матолыгина Н.Ю.	170
Исследование влияния структурных особенностей межпозвоночного диска на его напряженно-деформированное состояние Рикун Ю.А., Чайковская Т.В., Кульков С.Н.	171
Особенности изменений зеренной структуры в нанокристаллическом Ti при сдвиговом нагружении Крыжевич Д.С., Корчуганов А.В., Зольников К.П.	172
Особенности зарождения дефектов в наноразмерных кристаллах с оцк решеткой Зольников К.П., Корчуганов А.В., Крыжевич Д.С.	174
Механизмы коллективных атомных смещений, обуславливающих миграцию границ зерен в ванадии при сдвиговом нагружении Корчуганов А.В., Крыжевич Д.С., Зольников К.П.	175
Взаимосвязь зернограничной энергии и плотности упаковки в $\alpha\text{-Fe}$ Бакулин А.В., Кулькова С.Е.	176
Влияние кислорода и фтора на электронную структуру поверхности InAlAs Бакулин А.В., Фукс А.А., Аксенов М.С., Валишева Н.А., Кулькова С.Е.	178
Расчеты коэффициента диффузии кислорода в сплавах Ti-Al: первопринципный подход Кулькова С.Е., Бакулин А.В., Кульков С.С.	180
Влияние легирования на адгезионные свойства границы раздела $\text{Ti}_3\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3$ Бакулин А.В., Фукс А.А., Кулькова С.Е.	182

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Двумерная модель синтеза интерметаллидного композита с учетом «плавления» Букрина Н.В., Князева А.Г.	184
Влияние формы и длительности внешнего импульса на динамику перераспределения материала между тонкой пленкой и подложкой Парфенова Е.С., Князева А.Г.	185
Субмонослойная адсорбция щелочных металлов на поверхность Cu(001) Русина Г.Г., Борисова С.Д.	187
Компьютерное моделирование процессов набора прочности механоактивированных бетонных смесей Дмитриева М.А., Лейцин В.Н., Шаранова А.В.	188
Современные способы описания структуры порового пространства пористых материалов Смолин А.Ю., Еремина Г.М., Коростелев С.Ю.	190
Построение межатомных потенциалов V-W на основе данных CALPHAD об энтальпии образования Максименко В.Н., Липницкий А.Г., Неласов И.В.	192
Межатомный потенциал для моделирования диффузионных процессов в вольфраме Липницкий А.Г., Максименко В.Н., Неласов И.В., Картамышев А.И.	193
Роль ротационных мод деформации мезоуровня в формировании макроскопических кривых течения Макаров П.В., Смолин И.Ю., Бакеев Р.А.	194
Анализ взаимодействия дислокаций и дислокационных барьеров в ГЦК монокристалле меди Давлятшин Р.П., Волегов П.С.	195
Оценка напряжений и деформаций при росте новой фазы между частицей и матрицей в процессе синтеза композита Анисимова М.А., Князева А.Г.	197
Исследование влияния конфигурационного упорядочения атомов элементарной ячейки Ti-Al-N на механические свойства получаемого покрытия Дмитриев А.И., Никонов А.Ю., Еремеев С.В., Шугуров А.Р.	198
Многоуровневое моделирование эффективных характеристик многокомпонентных композиций на основе полифениленсульфида Панин С.В., Гришаева Н.Ю., Бочкарева С.А., Люкшин Б.А., Панов И.Л., Мухортин Е.И., Нгуен Дык Ань	199
Влияние границ зерен на особенности пластического оттеснения материала в кристаллитах титана при скретч тестировании Дмитриев А.И., Никонов А.Ю., Шугуров А.Р.	200
Построение функций отклика для мезомасштабных частиц Cu, Fe и C на основе молекулярно-динамического моделирования Никонов А.Ю., Дмитриев А.И.	201
Численное исследование влияния параметров среды на распространение медленных деформационных фронтов Микушина В.А., Смолин И.Ю.	202
Связанная модель синтеза композита в режиме горения Чумаков Ю.А., Князева А.Г.	203
Теоретическое изучение факторов, контролирующих режим адгезионного износа, методом дискретных элементов Дудкин И.В., Шилько Е.В., Попов В.Л.	204
Масштабный фактор и его роль в процессе роста трещины продольного сдвига в хрупких материалах Григорьев А.С., Шилько Е.В.	206
Селективная фильтрация воды с примесными ионами через прямоугольные нанопоры перспективных наномембран Цуканов А.А., Шилько Е.В.	207
Особенности перестройки приповерхностной структуры поликристалла меди на атомном масштабе при локальном динамическом нагружении Никонов А.Ю., Жармухамбетова А.М.	209
Локализация деформации и формирование остаточных напряжений в металлокерамических композитах и покрытиях Балохонов Р.Р., Романова В.А., Бакеев Р.А., Кульков А.С., Кульков С.Н.	210

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Численное исследование эффективности использования пористых пьезокерамических материалов в ультразвуковых излучателях Наседкин А.В.	212
Numerical Analysis of Fracture Initiation and Propagation in Weak Porous Sandstones Under Multiaxial Compression Eremin M.O.	214
Численное моделирование изнашивания двух шероховатых поверхностей биосовместимого керамического покрытия при трении Еремина Г.М., Смолин А.Ю.	215
Численное моделирование одноосного сжатия флюидонасыщенного модельного образца покрытия TiN Еремина Г.М., Смолин А.Ю.	217
Численное моделирование индентирования губчатой костной ткани Еремина Г.М., Смолин А.Ю.	219
Моделирование высокоскоростного нагружения [1-101]-монокристаллов магния Власова А.М.	221
Computer modeling of structure and calculation of the short-range order parameters disordered two-layers AB graphene Belosludtseva A.A., Bobenko N.G., Barkalov L.D., Ponomarev A.N.	223
Numerical simulation of deformation and fracture in polycrystalline aluminum at different strain rates Sergeev M.V., Balokhonov R.R., Romanova V.A., Emelianova E.S.	225
Конечно-элементный анализ механических характеристик материалов, получаемых методом электронно-лучевого аддитивного производства из металлического филамента Дудкин И.В., Шилько Е.В., Колубаев Е.А.	226
Теоретическое изучение закономерностей влияния чередования филаментов на макроскопические механические характеристики полиметаллических изделий, получаемых методом электронно-лучевого аддитивного производства Дудкин И.В., Шилько Е.В., Колубаев Е.А.	227
Modeling of the dynamic of self-assembly borophene by PFC Zapolsky N., Bobenko N., Ponomarev A., Khon Yu.	229
Влияние технологических параметров на акустическую эмиссию в процессе обработки. Молекулярно-динамическое исследование. Никонов А.Ю., Жармухамбетова А.М.	230
Анализ акустической эмиссии, возникающей при механической обработке кристаллита железа Никонов А.Ю., Жармухамбетова А.М.	231
Исследование влияния защитного газа на течение плазмы электрической дуги и расплавленного металла Кузнецов М.А., Солодский С.А., Крюков А.В., Крампит М.А.	232
Fracture modeling in specimens with I-, V- and U-shaped notches: a probabilistic approach in excitable cellular automata method Maksimov P.V., Moiseenko D.D., Panin S.V.	234
Finite deformation analysis of a prestressed elastic beam after the layer addition Levin V.A., Zingerman K.M., Vershinin A.V., Kononov D.A.	236
3D-finite element simulations of wedge splitting test of ZrO₂-Y₂O₃ ceramic double cantilever beam with chevron notch Lasko G., Deryugin Ye., Danilenko I., Lakusta M., Schmauder S.	237
Уравнения состояния нефтегазопроводов с учётом искривлений и комплекса воздействий Сильвестров С.А., Кантемиров И.Ф.	239
Алгоритм определения допустимых отклонений перемещений при оценке деформации материалов методом корреляции цифровых изображений Титков В.В., Панин С.В., Ерёмин А.В., Любутин П.С.	241

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

Ультразвуковая агломерация-дробление наночастиц алмаза Кудряшова О.Б., Верещагин А.Л., Балахнина А.В., Петров Е.А.	244
--	-----

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Effect of Elastic Grading on Fretting Wear Willert E., Popov V.L., Dmitriev A.I., Psakhie S.G.	246
Особенности адсорбции наночастиц на поверхности иерархически организованных наноструктур AlOOH в динамических условиях Ложкомоев А.С.	248
Многоуровневая иерархическая структура силумина, подвергнутого многоциклового поверхностному легированию Иванов Ю.Ф., Лопатин И.В., Петрикова Е.А., Рыгина М.Е., Толкачев О.С.	249
Применение иерархически организованного наноструктурного оксигидроксида алюминия для остановки кровотечений Ложкомоев А.С.	251
О совершенствовании оценки электропроводности наполненных полимеров по текстурной картине изображения макроструктуры Минакова Н.Н., Ушаков В.Я.	252
Применение показателя херста для оценки поведения наполненных полимеров в агрессивных средах Минакова Н.Н., Мансуров А.В.	253
Двойной эффект памяти формы и его циклическая стабильность в [001]- монокристаллах сплава CoNiGa Куксгаузен И.В., Победенная З.В., Куксгаузен Д.А., Чумляков Ю.И., Киреева И.В., Бессонова И.Г., Кириллов В.А.	254
Роль комбинированной неустойчивости Рэлея-Тейлора и Кельвина-Гельмгольца в образовании рельефа границы раздела покрытие/подложка при воздействии гетерогенных плазменных потоков Невский С.А., Сарычев В.Д., Грановский А.Ю., Коновалов С.В., Громов В.Е.	255
Влияние комбинированной обработки на структуру и микротвердость поверхностных слоев силумина АК10М2Н Шляров В.В., Загуляев Д.В., Рубанникова Ю.А., Громов В.Е.	256
Эффекты памяти формы и сверхэластичности в высокопрочных монокристаллах FeNiCoAlTi, упрочненных наночастицами Чумляков Ю.И., Киреева И.В., Куксгаузен И.В., Поклонов В.В., Победенная З.В., Бессонова И.Г., Куксгаузен Д.А., Niendorf T., Krooß P.	258
Исследование структурных особенностей монолитных пластин на основе никелида титана с целью создания пористо-монолитных конструкций Артюхова Н.В., Кафтارانова М.И., Аникеев С.Г.	260
Влияние условий нагружения на механические свойства и разрушение органических полимерных композитных материалов на основе эпоксидных смол, упрочненных нанодисперсными частицами Смирнов С.В.	262
Исследование влияния деформации прокаткой с последующими отжигами на механические свойства титанового сплава VT22 Мишин И.П., Найденкин Е.В., Раточка И.В., Лыкова О.Н., Манишева А.И.	264
Влияние имплантации алюминия на структурно-фазовое состояние и упрочнение ультрамелкозернистого титана Никоненко А.В., Попова Н.А., Никоненко Е.Л., Калашников М.П., Окс Е.М., Курзина И.А.	265
Композитные наночастицы (Cu_xMe_{1-x})O, где Me – Zn, Ag: синтез, свойства, антимикробная активность и цитотоксичность Кондранова А.М., Ложкомоев А.С., Казанцев С.О., Первигов А.В., Фоменко А.Н.	266
Влияние наночастиц диоксида кремния на механические свойства эпоксидных нанокомпозитов Брусенцева Т.А.	267
Влияние титана и молибдена на структурно-фазовое состояние жаропрочного сплава после пластической деформации Никоненко Е.Л., Попова Н.А., Конева Н.А.	269
Микроволокна ацетат целлюлозы, модифицированные наноструктурами AlOOH/Fe₂O₃: синтез, свойства и антимикробная активность Бакина О.В., Казанцев С.О., Кондранова А.М., Рубцов К.В.	271
Изменение морфологии поверхности и твёрдости поверхностного слоя сплава TiNi в зависимости от числа импульсов воздействия электронным пучком Дьяченко Ф.А., Атовуллаева А.А., Яковлев Е.В., Мейснер Л.Л.	272

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Влияние водорода на развитие деформации в титановом сплаве с иерархической ультрамелкозернистой структурой в интервале температур 293-973 К Грабовецкая Г.П., Забудченко О.В., Мишин И.П., Степанова Е.Н.	274
Исследование влияния структурного состояния на эффект памяти формы в монокристаллах сплава $\text{Co}_{49}\text{Ni}_{21}\text{Ga}_{30}$ Победенная Э.В., Куксгаузен И.В., Куксгаузен Д.А., Киреева И.В., Чумляков Ю.И.	275
Исследование имплантации модифицированных в плазме мембран в хирургическом лечении буллезной кератопатии Филиппова Е.О.	276
Исследование применения мембран в хирургическом лечении буллезной кератопатии Филиппова Е.О., Иванова Н.М., Горбунова Е.А.	278
Свойства тонких пленок на основе полимолочной кислоты после паровой стерилизации Филиппова Е.О., Иванова Н.М.	280
Металлопорошковая композиция на основе бимодального порошка коррозионностойкого сплава 316L Торопков Н.Е., Глазкова Е.А., Родкевич Н.Г., Первиков А.В., Лернер М.И., Мужецкая С.Ю.	282
Структура и закономерности ползучести сплава системы Zr-Nb-H, облученного импульсным электронным пучком Степанова Е.Н., Грабовецкая Г.П., Мишин И.П., Тересов А.Д.	284
Коалесценция детонационного углерода при ультразвуковом облучении в кавитационном режиме Верещагин А.Л., Бычин Н.В., Кудряшова О.Б., Петров Е.А.	285
Антимикробная активность наночастиц CuFe_2O_4, полученных совместным электрическим взрывом Fe и Cu проволок в кислородсодержащей атмосфере Фоменко А.Н., Кондранова А.М., Казанцев С.О., Ложкомоев А.С., Первиков А.В.	286
Влияние электронно-лучевой обработки на химический состав и статические смещения атомов в приповерхностном слое Cr-Mn-N аустенитной стали Наркевич Н.А., Сурикова Н.С., Первалова О.Б., Власов И.В., Наркевич В.В., Дерюгин Е.Е.	288
Кинетика роста поверхностной окалины в процессе химико-термической обработки сплава V-Cr-Ta-Zr Смирнов И.В., Цверова А.С., Гриняев К.В., Тюменцев А.Н., Чернов В.М., Дитенберг И.А.	290
Биодеградируемые сосудистые заплаты из поликапролактона, содержащие сосудистый эндотелиальный фактор роста, для проведения ангиопластики Севостьянова В.В., Миронов А.В., Кривкина Е.О., Ханова М.Ю., Великанова Е.А., Матвеева В.Г., Глушкова Т.В., Антонова Л.В., Барбараш Л.С.	291
Синтез пористых наноструктур $\gamma\text{-AlOOH}$ окислением алюмонитридной композиции в водном растворе полиакрилата натрия Рубцов К.В., Ложкомоев А.С., Хоробрая Е.Г.	293
Пластические вращения Гриняев Ю.В.	295
Thermodynamic Parameters of Shock Wave Loading of Carbides with Various Stoichiometric Compositions Maevskii K.K.	297
Влияние структурно-фазового состояния на сверхпластичные свойства титанового сплава ПТЗВ Раточка И.В., Лыкова О.Н., Мишин И.П., Найденкин Е.В.	298
Конвективный и диффузионный режимы течения биологической жидкости через пористую стенку цилиндра Назаренко Н.Н., Князева А.Г.	299
Влияние нагрузки при фрикционной обработке на качество поверхности $\text{NiCrBSi-Cr}_3\text{C}_2$ покрытия, сформированного лазерной наплавкой Соболева Н.Н., Макаров А.В., Скорынина П.А., Николаева Е.П., Малыгина И.Ю.	300
Особенности высокодефектных структурных состояний в порошках металлов после механической активации Дитенберг И.А., Тюменцев А.Н., Корчагин М.А.	301
Термическая стабильность микроструктуры и микротвердости образцов Ni_3Al, синтезированных методом искрового плазменного спекания, в зависимости от продолжительности предварительной механической активации Осипов Д.А., Смирнов И.В., Гриняев К.В., Мельников В.В., Корчагин М.А., Дитенберг И.А.	302

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Моделирование радиационно-индуцированных зарядовых эффектов в гетерогенных материалах пористого типа	
Алексеев М.В., Воронин Ф.Н., Жуковский М.Е., Савенков Е.Б., Усков Р.В.	303
Сверхэластичность и эффект памяти формы в высоконикелевых монокристаллах Ti-51.7Ni после ступенчатого старения	
Тимофеева Е.Е., Пичкалева М.В., Суриков Н.Ю., Тагильцев А.И., Ефтифеева А.С., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.	304
Наноламинат системы Cu-Al, полученный путем механической активации с последующим кручением под давлением	
Гриняев К.В., Смирнов И.В., Корчагин А.Н., Дитенберг И.А.	305
Высокотемпературная сверхэластичность в гетерофазных монокристаллах сплава Ni₄₉Fe₁₈Ga₂₇Co₆ (ат.%)	
Ларченкова Н.Г., Панченко Е.Ю., Тохметова А.Б., Чумляков Ю.И.	306
Влияние температуры старения в мартенсите под нагрузкой на двусторонний эффект памяти формы в монокристаллах сплава Ni₄₉Fe₁₈Ga₂₇Co₆ (ат. %)	
Тохметова А.Б., Ларченкова Н.Г., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.	308
Ориентационная зависимость термического гистерезиса при развитии R-B19' мп в состаренных монокристаллах сплава Ni_{50,6}Ti_{49,4}	
Суриков Н.Ю., Тимофеева Е.Е., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.	310
Синтез и исследование цитотоксичности композитов на основе гидрогеля полиакрилата натрия и γ-AlOOH	
Рубцов К.В., Кондранова А.М., Фоменко А.Н., Бакина О.В., Ложкомоев А.С.	312
Содержание фаз на тоберитовой основе в CSH геле портландцемента с разным водоцементным отношением	
Абзаев Ю.А., Гныря А.И., Коробков С.В.	314
Исследование акустической эффективности ячеек зпк конической формы при различных уровнях звукового давления	
Писарев П.В., Максимова К.А., Храпцов И.В.	315
Численное прогнозирование механических характеристик и определение коэффициентов линейного теплового расширения сотовой звукопоглощающей конструкции	
Писарев П.В., Ермаков Д.А., Максимова К.А.	317
Моделирование зернограницной диффузия с учетом формы зерна	
Чепак-Гизбрехт М.В.	319
Bone-Like Multilevel Calcium Phosphate Coating Modulates an Interaction of Mesenchymal Stem Cells and Tumor Cells	
Malashchenko V.V., Shunkin E.O., Shupletsova V.V., Khaziakhmatova O.G., Yurova K.A., Melashchenko E.S., Litvinova L.S., Khlusov I.A., Komarova E.G., Chebodaeva V.V., Sharkeev Yu.P.	320
Антифрикционные композиты на основе полиэфирэфиркетона (ПЭЭК)	
Нгуен дык Ань, Панин С.В., Корниенко Л.А., Иванова Л.Р.	322
Structural Heterogeneity of Ultrafine-Grained FCC Metals Processed Through Equal-Channel Angular Pressing on Meso- and Macroscale Levels	
Ivanov K.V.	323
Численное моделирование распространения электромагнитного излучения в гетерогенном материале с прямым разрешением его микроструктуры	
Алексеев М.В., Савенков Е.Б., Березин А.В., Марков М.Б., Садовничий Д.Н.	324
Исследование материалов, полученных в процессе электроискрового плазменного спекания алюминида никеля и циркония	
Шевцова Л.И., Немолочнов Д.А., Волков Д.С.	326
Стабильность двустороннего эффекта памяти формы к перегревам и противодействующим нагрузкам в монокристаллах сплава CoNiAl	
Ефтифеева А.С., Панченко Е.Ю., Чумляков Ю.И.	328
Большие обратимые деформации в состаренных под нагрузкой в мартенсите монокристаллах сплавов NiFeGaCo и NiMnGa	
Панченко Е.Ю., Тимофеева Е.Е., Ларченкова Н.Г., Пичкалева М.В., Ефтифеева А.С., Тохметова А.Б., Тагильцев А.И., Суриков Н.Ю., Чумляков Ю.И.	330
Роль оксида FeO при создании многоуровневой структуры поверхностного слоя металлических материалов в зоне сухого скольжения под воздействием электрического тока	
Фадин В.В., Алеутдинова М.И.	332

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Влияние твёрдых растворов в первичной структуре композитов на устойчивость при сдвиге их поверхностных слоёв в сухом скользящем контакте с высокой плотностью тока Фадин В.В., Алеутдинова М.И.	333
Effects of Deformation of the High-Temperature Synthesis Product on the Grain Size of the Ni₃Al Intermetallic Compound Synthesized Under Pressure Ovcharenko V.E., Akimov K.O., Boyangin E.N.	334
Термическая стабильность двойниковых границ при отжигах высокомарганцевых аустенитных сталей, подвергнутых кручению под высоким давлением Майер Г.Г., Астафурова Е.Г.	336
Получение рецептуры композиций полифениленсульфида с углеродными волокнами различной длины Панин С.В., Гришаева Н.Ю., Бочкарева С.А., Люкшин Б.А., Панов И.Л., Нгуен Дык Ань, Ле Ми Тхи Хиеп	337
Влияние механизма дисперсионного твердения на закономерности водородного охрупчивания высокоазотистой аустенитной стали, легированной ванадием Панченко М.Ю., Астафурова Е.Г., Майер Г.Г., Мельников Е.В., Москвина В.А., Астафуров С.В., Михно А.С., Тумбусова И.А.	339
Термическая стабильность микроструктуры и механических свойств жаропрочной малоактивируемой 12%-Cr ферритно-мартенситной стали ЭК-181 Полехина Н.А., Алмаева К.В., Литовченко И.Ю., Тюменцев А.Н., Чернов В.М., Леонтьева-Смирнова М.В.	340
Электрохимическое гидрирование механически активированного порошкового никелида титана Абдульменова Е.В., Кульков С.Н.	342
Исследование особенностей структуры и свойств малоуглеродистых низколегированных трубных Cr-Mo сталей, эксплуатируемых в сероводородсодержащей среде Путилова Е.А., Задворкин С.М., Горкунов Э.С., Веселов И.Н., Пышминцев И.Ю.	344
Получение биосовместимых сплавов системы Ti-Nb методом порошковой металлургии с применением релятивистского электронного пучка вне вакуума Глухов И.А., Голковский М.Г., Майрамбекова А.М., Шаркеев Ю.П.	346
Влияние термообработки на прочность и пластичность стали AISI 304, полученной методом проволоочной электронно-лучевой печати Панченко М.Ю., Москвина В.А., Астафуров С.В., Майер Г.Г., Мельников Е.В., Рубцов В.Е., Колубаев Е.А., Астафурова Е.Г.	347
Исследование влияния энергии дефекта упаковки на параметры соотношения Холла-Петча для аустенитных нержавеющей сталей Астафуров С.В., Майер Г.Г., Мельников Е.В., Москвина В.А., Панченко М.Ю., Астафурова Е.Г.	348
Закономерности и механизмы пластической деформации и разрушения ванадийсодержащих хромомарганцевых сталей с высоким содержанием углерода и азота Астафурова Е.Г., Астафуров С.В., Майер Г.Г., Мельников Е.В., Москвина В.А., Панченко М.Ю., Гальченко Н.К., Тумбусова И.А.	349
Влияние продолжительности старения на микроструктуру, фазовый состав и микротвердость высокоазотистой аустенитной стали Тумбусова И.А., Майер Г.Г., Панченко М.Ю., Москвина В.А., Мельников Е.В., Астафуров С.В., Михно А.С., Гальченко Н.К., Астафурова Е.Г.	350
Effect of Tantalum on the Tensile Properties of 12%Cr Martensitic Steels for Steam Blades Fedoseeva A.E., Nikitin I.S., Fedoseev A.E., Dudova N.R., Kaibyshev R.O.	351
Effect of Heat Treatment on Structure and Mechanical Properties of 12Cr-3Co Steel with Low N and High B Contents Nikitin I.S., Fedoseeva A.E., Odnobokova M.V., Dudova N.R., Kaibyshev R.O.	352
Effect of Warm Rolling on Grain Refinement and Mechanical Properties of Austenitic Stainless Steel Odnobokova M., Belyakov A., Fedoseeva A., Kaibyshev R.	353
Экспериментальные исследования прочности элементов космической техники при воздействии мелких фрагментов космического и техногенного мусора Добрица Д.Б., Жалнин Е.В., Пашков С.В., Христенко Ю.Ф.	354
Особенности технологического процесса термоштамповки изделий из термопластичных композиционных материалов Аношкин А.Н., Шипунов Г.С., Баранов М.А., Головин Д.В.	356

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Исследование структурно-фазового состояния и свойств ударопрочных защитных покрытий системы Zr-Y-O на подложках Si	
Божко И.А., Поданев А.П., Калашников М.П., Федорищева М.В., Сергеев В.П.	358
Особенности деформированной микроструктуры ферритно-мартенситной стали ЭК-181 после высокотемпературной термомеханической обработки	
Алмаева К.В., Полехина Н.А., Литовченко И.Ю., Тюменцев А.Н., Чернов В.М., Леонтьева-Смирнова М.В.	360
Особенности микроструктуры и механических свойств ферритно-мартенситной стали ЭП-823 после высокотемпературной термомеханической обработки	
Алмаева К.В., Линник В.В., Литовченко И.Ю., Полехина Н.А., Тюменцев А.Н., Чернов В.М., Леонтьева-Смирнова М.В.	362
Влияние деформационно-термической обработки на коррозионные и трибологические свойства композита Ti-15Mo/TiB	
Озеров М.С., Газизова М.Ю., Степанов Н.Д., Жеребцов С.В.	363
Метод определения модулей упругости наночастиц используя модели гомогенизации	
Филиппов А.А., Фомин В.М.	365
Особенности микроструктуры объема и элементного состава поверхности ферритно-мартенситной стали ЭК-181 после длительной выдержки в теплоносителе	
Литовченко И.Ю., Алмаева К.В., Полехина Н.А., Пинжин Ю.П., Тюменцев А.Н., Чернов В.М., Леонтьева-Смирнова М.В.	367
Влияние бимодальной структуры полученной равноканальным угловым прессованием и последующей прокаткой на сверхпластическое поведение Al-Mg-Sc-Zr сплава	
Автокротова Е.В., Латыпова О.Э., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.	368
Микроструктура, статическая прочность и сверхпластичность алюминиевого сплава 1570С, подвергнутого всесторонней ковке с понижением температуры	
Ситдииков О.Ш., Автокротова Е.В., Ильясов Р.Р., Латыпова О.Э., Маркушев М.В.	369
Особенности микроструктуры и механические свойства аустенитной стали ЭК-164 в условиях термомеханических обработок	
Аккузин С.А., Литовченко И.Ю., Тюменцев А.Н.	370
Влияние высокотемпературной термомеханической обработки на особенности микроструктуры и механические свойства высокоазотистой аустенитной стали	
Салова Ю.С., Литовченко И.Ю., Аккузин С.А., Тюменцев А.Н., Наркевич Н.А.	371
Численное моделирование интенсивной пластической деформации при динамическом рифлении прессованием	
Ахметшин Л.Р., Москвичев Е.Н.	372
Морфология ультраволокнистых материалов на основе поли-(3-гидроксипропаната) медицинского назначения	
Ольхов А.А., Тюбаева П.М., Филатова А.Г., Зернова Ю.Н., Жулькина А.Л., Кучеренко Е.Л., Иорданский А.Л.	374
The Grain Structure in the Layer of Zr-Y-O in Coating on the Basis of Zr-Y-O / Si- Al-N Depend on Annealing Time at 900C in the «In-Situ» Mode	
Fedorischeva M.V, Kalashnikov M.P, Bozhko I.A.and Sergeev V.P.	376
Структурно-фазовое состояние медной подложки при обработке ионным пучком циркония	
Федорищева М.В., Калашников М.П., Божко И.А., Сергеев В.П.	377
Влияние химического и фазового состава на механические свойства и термическую стабильность ультрамелкозернистых титановых сплавов	
Найденкин Е.В., Раточка И.В., Мишин И.П., Лыкова О.Н.	379
Исследование влияния поперечно-винтовой прокатки на структуру и механические свойства трубной стали 09Г2С	
Власов И.В., Сурикова Н.С., Мишин И.П., Панин С.В., Смирнова А.С., Яковлев А.В., Станкевич Р.В.	380
Изменение механических и физико-химических свойств поверхностного слоя сплава TiNi в зависимости от числа импульсов воздействия электронным пучком	
Дьяченко Ф.А., Яковлев Е.В., Мейснер Л.Л., Шулепов И.А., Атовуллаева А.А.	382
Влияние низкоэнергетической механической обработки на структуру порошка Al₂O₃-ZrO₂-Y₂O₃ и свойства спеченной керамики	
Севостьянова И.Н., Саблина Т.Ю., Молчунова Л.М., Рыжова Л.Н., Буюкова С.П., Кульков С.Н.	384

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Структура и свойства силикатных покрытий на биорезорбируемом сплаве Mg-0.8Ca Угодчикова А.В., Седельникова М.Б., Шаркеев Ю.П., Толкачева Т.В., Комарова Е.Г., Толмачев А.И., Шмидт Д.	385
Высокоэнтропийная трехкомпонентная керамика (Zr, Hf, Nb)C Ван Дакунь, Бурлаченко А.Г., Мировой Ю.А., Буяков А.С., Дудина Д.В., Есиков М.А., Кульков С.Н., Буякова С.П.	387
Формирования многофункциональных поверхностных композиций с иерархической структурой из высокоэнтропийных материалов с эффектом памяти формы Бледнова Ж.М., Русинов П.О.	388
Самозалечивание в керамиках ZrB₂-ZrC-SiC-ZrO₂ Дедова Е.С, Бурлаченко А.Г., Мировой Ю.А., Буяков А.С., Буякова С.П.	390
Структура композитов TiC-TiNi, полученных спеканием под давлением Деркач Е.А., Буякова С.П.	391
Особенности электрохимической коррозии криокатаного и состаренного алюминиевого сплава Крымский С.В., Ильясов Р.Р., Пинегина А.А., Автократова Е.В.,	392
Изучение микроструктуры и низкотемпературного разрушения промышленной низкоуглеродистой трубной стали для современных газопроводов Деревягина Л.С., Гордиенко А.И., Сурикова Н.С.	394
Транспортные свойства двухслойных графенов во внешних полях с нарушенной симметрией основного состояния Мищук Б.Р., Решетняк А.А.	396
Формирование иерархической поровой структуры и морфологии поверхности в микродуговых кальций-фосфатных покрытиях Комарова Е.Г., Чебодаева В.В., Хлусов И.А., Литвинова Л.С., Шаркеев Ю.П.	398
К теории напряжения течения в мультимодальных поликристаллических агрегатах. Эффект дисперсионного упрочнения Решетняк А.А., Шаркеев Ю.П., Чевизович Д.	400
Влияние исходного структурного состояния сплава Ti_{49,3}Ni_{50,7}(ат.%) на проявление термомеханической памяти при деформировании кручением Жапова Д.Ю., Гришков В.Н., Лотков А.И., Тимкин В.Н., Гусаренко А.А.	403
Разрушение сплавов VT1-0 и Zr-1 мас. %Nb в различных структурных состояниях при нагружении в режиме гигацикловой усталости Майрамбекова А.М., Шаркеев Ю.П., Наймарк О.Б., Банников М.В., Ерошенко А.Ю., Оборин В.А.	404
Особенности изменения динамических характеристик композитов в зависимости от количества слоев и их укладки Красновейкин В.А., Дружинин Н.В.	405
Применение порошковых катодов Ti-Al, Ti-Al-Si для вакуумно-дугового синтеза нитридных покрытий Прибытков Г.А., Фирсина И.А., Коростелева Е.Н., Коржова В.В., Степанов И.Б., Иванов Ю.Ф.	406
Структурные превращения в порошковых Al-Cr прессовках при нагреве на воздухе Прибытков Г.А., Коржова В.В., Коростелева Е.Н.	407
Obtaining OF Heteromodulus ZrC-Based Composite Materials, Their Structure and Properties Mirovoy Yu.A., Burlachenko A.G., Buyakova S.P.	409
Слоистый теплозащитный керамический материал HfC-ZrB₂-SiC-ZrO₂ Мировой Ю.А., Бурлаченко А.Г., Буякова С.П., Дедова Е.С., Кульков С.Н.	410
Исследование влияния структурно-фазового состояния керамики на основе ZrO₂ на устойчивость к термоударным воздействиям Мировой Ю.А., Бурлаченко А.Г., Дедова Е.С., Деркач Е.А., Буякова С.П.	411
Влияние термообработок на структуру, фазовые превращения и неупругость нанокристаллического сплава Ti-50,9 ат. % Ni Полетика Т.М., Гирсова Н.В., Гирсова С.Л., Гришков В.Н., Лотков А.И.	413
Свободная энергия поверхности TiNi сплава после ионно-пучковой обработки и её влияние на пролиферативную активность стволовых клеток Гудимова Е.Ю., Шабалина О.И., Мейснер Л.Л., Иванова Н.М.	415
Наноструктурирование аморфной металлической пленки, инициированное миллисекундным тепловым импульсом Слядников Е.Е., Хон Ю.А., Турчановский И.Ю., Каминский П.П.	417

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Кальцийфосфатные мишени для ВЧ магнетронного распыления биопокрытий Болат-оол А.А., Просолов К.А., Химич М.А., Чебодаева В.В., Уваркин П.В., Толмачев А.И., Белявская О.А., Шаркеев Ю.П.	419
Механические и трибологические характеристики боактивного композита гидроксиапатит-мунт Пономарев А.Н., Резванова А.Е., Барабашко М.С.	421
Микроструктура, механические свойства и термостабильность биоинертных сплавов Ti-45 мас. % Nb и Zr-1 мас. % Nb в ультрамелкозернистом состоянии Ерошенко А.Ю., Шаркеев Ю.П., Химич М.А., Глухов И.А., Уваркин П.В., Майрамбекова А.М., Толмачев А.И.	422
Структура ближнего и среднего порядка в аморфном Ti-Ni-Ta поверхностном сплаве после низкотемпературного отжига, исследованная методами просвечивающей электронной микроскопии Семин В.О., Мухамедова Р.Р., Мейснер Л.Л., Ротштейн В.П.	423
Термомеханические напряжения в переходной зоне никелида титана с покрытием из кремния или тантала Князева А.Г., Маслов А.Л., Крюкова О.Н.	425
Неоднородность деформации нанокристаллического сплава Ti - 50,9 ат. % Ni при механическом циклировании Полетика Т.М., Гирсова С.Л., Гирсова Н.В., Биттер С.М.	426
Влияние размера исходного порошка свмпэ на механические и триботехнические характеристики композитов, армированных функционализированным стекловолокном Панин С.В., Хуан Цитао, Корниенко Л.А., Буслович Д.Г., Алексенко В.О.	427
Механические и триботехнические свойства твердосмазочных композитов на основе полиимида Панин С.В., Ло Цзянкунь, Корниенко Л.А., Буслович Д.Г., Алексенко В.О.	428
Формирование кальцийфосфатных микродуговых покрытий с импрегнированными цинксодержащими наночастицами Чебодаева В.В., Седельникова М.Б., Бажанова В.С., Шаркеев Ю.П.	429
Grain Characteristics and Mechanical Properties of Bioinert Ti-40 wt. %Nb alloy Zhu Qifang, Sharkeev Yu.P., Eroshenko A.Yu., Sun Zeming, Zhang Hongju, Han Xiaole, Glukhov I.A., Mairambekova A.M.	431
Температурная зависимость напряжения мартенситного сдвига и предела текучести в крупнозернистых образцах сплава Ti_{49.3}Ni_{50.7}(ат.%) Жапова Д.Ю., Лотков А.И., Гришков В.Н., Гусаренко А.А., Тимкин В.Н.	432
Самозалечивание в высокотемпературных керамиках ZrB₂-SiC Бурлаченко А.Г., Мировой Ю.А., Дедова Е.С., Буякова С.П.	434
Медицинский полиуретан с улучшенной биосовместимостью после обработки методом ионной имплантации Чудинов В.С., Шардаков И.Н., Маслова В.В., Солодников С.Ю., Фефилова И.В., Литвинов В.В., Фрейнд Г.Г., Кондюрин А.В.	436
Влияние ультразвуковых колебаний при микродуговом оксидировании на адгезионную прочность кальцийфосфатных покрытий Казанцева Е.А., Комарова Е.Г.	438
Влияние пористости на структурно-фазовое состояние керамики ZrO₂-Y₂O₃ Савченко Н.Л., Саблина Т.Ю., Севостьянова И.Н.	440
Mechanical Activation of Self-Propagating High Temperature Synthesis in Titanium, Carbon Black and Iron-Based Alloy Powder Mixtures Baranovskiy A.V., Pribytkov G.A., Krinitcyn M.G., Nomyakov V.V., Dankovcev G.O.	441
Влияние термической обработки на структуру и свойства жаропрочного никелевого сплава ЖС6У Корниенко Е.Е., Рашковец М.В., Лазуренко Д.В.	443
Формирование пористого кремния методами металл-стимулированного химического травления и электрохимического травления Круковский К.В., Кашин О.А., Лотков А.И.	445
Распределение структурных характеристик и фазового состава в покрытиях, полученных при наплавке порошковой смеси Cr₃C₂ + TiC на низкоуглеродистую сталь пучком релятивистских электронов Иванов К.В., Овчаренко В.Е.	447
Влияние типа и замера наполнителей, функционализированных обработкой силансодержащим модификатором KH550, на механические и триботехнические свойства композитов на основе СВМПЭ Панин С.В., Хуан Цитао, Корниенко Л.А., Буслович Д.Г., Алексенко В.О.	448

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Влияние деформационного упрочнения, вызванного поперечно винтовой прокаткой, на ударную вязкость стали 09Г2С	
Смирнова А.С., Власов И.В., Сурикова Н.С., Яковлев А.В., Мишин И.П., Панин С.В.	450
Развитие обратимой неупругой деформации в двойном сплаве на основе TiNi при изотермическом механоциклировании изгибом образцов в В2 фазе	
Тимкин В.Н., Гришков В.Н., Лотков А.И., Жапова Д.Ю.	452

Секция 5. Деградация тонких пленок и многослойных покрытий как иерархически организованных структур

The Degree of Polymer Oxidation and Its Effect on Structure and Properties of LDPE Films	
Zykova A.K., Pantyukhov P.V., Monakhova T.V., Shatalova O.V., Krivandin A.V., Popov A.A.	454
Влияние промежуточных слоев Ti-Al на разрушение многослойных покрытий на основе Ti-Al-N при одноосном растяжении и их стойкость к окислению	
Шугуров А.Р., Кастеров А.М., Кузьминов Е.Д.	456
Влияние содержания Ta в покрытиях Ti-Al-Ta-N на их структуру и механические свойства	
Шугуров А.Р., Кузьминов Е.Д., Кастеров А.М., Акуликин А.А., Панин А.В.	458
Импантация нержавеющей стали ионами алюминия, бора, кислорода и её коррозионная стойкость	
Дорофеева Т.И., Губайдулина Т.А., Сергеев О.В., Сунгатулин А.Р., Сергеев В.П.	460
Особенности диффузии в переходной зоне «покрытие (Si,Ta) –подложка (TiNi)» при внешнем нагреве	
Князева А.Г., Крюкова О.Н., Маслов А.Л.	462
Нанокompозитные Ti-Ni-Nb и Ti-Ni-Ta поверхностные сплавы: моделирование, аддитивный тонкопленочный электронно-пучковый синтез и характеристика микроструктуры	
Мейснер Л.Л.	463
Изнашивание магнетронных покрытий на основе системы Cu-Mo-S в условиях приложения электрического тока	
Жарков С.Ю., Сергеев В.П., Калашников М.П.	464
Кинетика термоокислительной деструкции полимерных смесей на основе полилактида	
Подзорова М.В., Тертышная Ю.В., Попов А.А.	465
Влияние термоокисления на биодеградацию изотактического полипропилена, полиамида 6/66-4 и смесей на их основе	
Воронцов Н.В., Марголин А.Л., Попов А.А.	466
Состав и структура градиентно-слоистых покрытий: легированный нитрид титана - дисперсно-упрочнённый аморфный углерод	
Овчинников С.В., Слабодчиков В.А., Кузнецов В.М.	467

Секция 6. Методы и средства неразрушающего контроля материалов и конструкций с иерархической структурой

Рентгеновский метод количественной оценки величины модуля упругости в материалах с градиентным изменением параметров структуры	
Остапенко М.Г., Мейснер Л.Л.	470
Влияние состава двухфазной системы Pb-Sn на акустическую эмиссию при пластической деформации	
Салита Д.С., Поляков В.В.	472
Особенности акустической эмиссии при пластической деформации и разрушении титана	
Дмитриев А.А., Поляков В.В.	474
Применение EBSD-анализа для исследования структуры и распределения остаточных напряжений в сварных трубах из стали 13ХФА	
Горкунов Э.С., Задворкин С.М., Горулева Л.С., Путилова Е.А., Мальцева А.Н.	476
Численное моделирование процесса теплового контроля в конструкции с сотовым наполнителем	
Аношкин А.Н., Головин Д.В., Пеленев К.А., Осокин В.М.	477
Молекулярно-динамическое исследование акустической эмиссии, возникающей в процессе обработки материала скользящим индентором	
Никонов А.Ю., Жармухамбетова А.М.	479
Особенности использования высокоразрешающей рентгеновской компьютерной томографии для контроля микроструктуры композитов В4С	
Коробенков М.В., Нарикович А.С., Левков Р.В., Снигирев А.А.	481

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Анализ изменения механических и тепловых характеристик конструкционных сталей после длительной эксплуатации	
Смирнов А.Н., Абабков Н.В., Данилов В.И., Пимонов М.В.	482
Simulation of Aluminum Panel Damage Detection Using Ultrasonic Lamb Waves	
Burkov M.V., Byakov A.V.	483
Simulation and Experimental Verification of the Process of Damage Detection of CFRP Subjected to Drop-Weight Impact Loading	
Burkov M.V.	484
Комплексный экспериментальный подход обнаружения дефектов в углерод-углеродном композите методами лазерной виброметрии и оптической термографии	
Красновейкин В.А., Дружинин Н.В., Дерусова Д.А., Шпильной В.Ю.	485
Исследование температурного поля при интенсивном трении УМЗ материалов методом ИК термографии	
Филиппов А.В., Тарасов С.Ю.	486
Вибромониторинг процесса трещинообразования в железобетонных конструкциях	
Цветков Р.В., Шардаков И.Н., Шестаков А.П., Глот И.О.	488
Практическое применение алгоритм расчета J-интеграла по данным определения оптического потока при механических испытаниях материалов	
Титков В.В., Панин С.В., Ерёмин А.В., Любутин П.С., Козулин А.А.	490
Raman Scattering in C60@SWCNTS peapods	
Maslova O.A., Yuzyuk Yu.I., Barannikova S.A.	492
On the Determination of Graphene Edge Chirality Via Raman Spectroscopy	
Maslova O.A., Yuzyuk Yu.I., Barannikova S.A.	493

Секция 7. Сварка, родственные процессы и технологии для создания технических систем ответственного и специального назначения, в том числе для эксплуатации в экстремальных условиях и низких климатических температур Арктики и Крайнего Севера

Влияние технологических режимов получения образцов из титанового сплава методом электронно-лучевого аддитивного производства на их структуру и механические свойства	
Калашников К.Н., Чумаевский А.В., Калашникова Т.А.	495
Исследование морфологии поверхности образцов титанового сплава, полученных методом электронно-лучевой 3D-печати	
Калашников К.Н., Иванов А.Н., Рубцов В.Е., Калашникова Т.А.	496
Особенности разрушения образцов сплава ВТ6, полученных электронно лучевым аддитивным методом	
Калашников К.Н., Белобородов В.А., Дмитриев А.В., Жуков Л.Л.	497
Особенности образования дефектов в изделии из жаропрочного сплава на основе никеля, полученном методом электронно-лучевой аддитивной технологии	
Гурьянов Д.А., Фортуна С.В., Калашников К.Н., Осипович К.С.	498
Исследование прочности тонкостенных алюминиевых конструкций, полученных методом аддитивно-субтрактивного производства	
Филиппов А.В., Шамарин Н.Н., Утяганова В., Рубцов В.Е.	500
Исследование коррозионной стойкости напечатанного электронно-лучевым методом сплава АМГ5	
Филиппов А.В., Шамарин Н.Н., Утяганова В.	501
Выбор смазочных материалов для волочения филаментов из сплава 55Ni-10W-9,5Co-8,5Cr, применяемых в аддитивной электронно-лучевой технологии	
Попелюх А.И., Тюрин А.Г., Руктуев А.А., Корниенко Е.Е., Рашковец М.В.	502
Особенности структурно-фазового состояния доэвтектического силумина марки АК7Ч	
Казанцева Л.А., Курзина И.А.	504
Точность построения изделий из нержавеющей стали аддитивным электронно-лучевым методом	
Калашников К.Н., Осипович К.С., Калашникова Т.А.	505
Исследование металлокерамических композиционных материалов, получаемых в процессе лазерной наплавки	
Гольшев А.А., Филиппов А.А.	507
Особенности направленной кристаллизации суперсплава на основе никеля в процессе локальной металлургии	
Фортуна С.В., Гурьянов Д.А., Калашников К.Н.	509

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Микроструктура образцов из нержавеющей стали марки 12X18H9T, полученных методом электронно-лучевой аддитивной металлургии Осипович К.С., Калашников К.Н.	510
Механические свойства образцов стали марки 12X18H9T, изготовленных методом электронно-лучевой металлургии Осипович К.С., Калашников К.Н., Гурьянов Д.А.	511
Модификация поверхности 3D напечатанных образцов титанового сплава Ti-6Al-4V путем электронно-пучковой и ультразвуковой ударной обработок Синякова Е.А., Панин А.В., Панин С.В.	512
Применение высококонцентрированных пучков энергии для формирования алюминидов титана Матц О.Э., Рашковец М.В., Чучкова Л.В.	514
Требования к филаментам для металлургии локальных объемов материалов в аддитивных технологиях Буров В.Г.	516
Повышение износостойкости титановых сплавов с применением аддитивных технологий электронно-лучевой обработки Чучкова Л.В., Белов А.С., Матц О.Э.	518
Формирование никельсодержащих покрытий методами электронно-лучевой наплавки и плазменного напыления Зимоглядова Т.А., Корниенко Е.Е., Дробяз Е.А., Егорова А.С.	520
Влияние связующего на характеристики металлопорошковой композиции на основе бимодального порошка сплава 316L Торопков Н.Е., Глазкова Е.А., Родкевич Н.Г., Первиков А.В., Лернер М.И.	522
A Comparative Study of the Macroscopical and Microscopical Fracture Mechanisms in Cast and Additively Manufactured Austenitic Stainless Steels Moskvina V.A., Panchenko M.Yu., Maier G.G., Astafurov S.V., Melnikov E.V., Rubtsov V.E., Kolubaev E.A., Astafurova E.G.	524
Microstructural Inhomogeneity of Phase Composition and Grain Structure in Electron Beam Wire-Feed Additive Manufactured AISI 304 Stainless Steel Panchenko M.Yu., Maier G.G., Moskvina V.A., Melnikov E.V., Astafurov S.V., Rubtsov V.E., Kolubaev E.A., Astafurova E.G.	525
Структура железоникелевых инваров, полученных спеканием порошков Абдульменова Е.В., Кульков С.Н.	526
Кинетика структурирования в адгезионном слое при создании объектов в технологии LOM Сайфуллин Э.Р., Князева А.Г.	528
Структура полиметаллических изделий, изготовленных методом электронно-лучевой 3D-печати с использованием проволоки из нержавеющей стали 12X18H9T и меди М1 Осипович К.С., Воронцов А.В., Калашников К.Н., Калашникова Т.А.	530
Повышение износостойкости 3D-напечатанных образцов титанового сплава Ti-6Al-4V путем оксидирования Евтушенко О.В., Панин А.В., Казаченок М.С., Буслевич Д.Г., Мартынов С.А.	532
Образование α'' мартенсита в титановом сплаве Ti-6Al-4V, полученном методом 3D-печати Перевалова О.Б., Панин А.В., Казаченок М.С.	534
Ударная вязкость образцов из титанового сплава Ti-6Al-4V, полученных методами аддитивных технологий Казаченок М.С., Власов И.В., Панин А.В.	535
Электронно-лучевая аддитивная технология получения композита TiC/ Ti-6Al-4V Буйлук А.О., Панин А.В., Казаченок М.С.	536
Особенности формирования сварного шва в 3D-напечатанных изделиях из титанового сплава Ti-6Al-4V Яхин А., Панин А.В.	537
Электронно-лучевая аддитивная технология Al-Mg сплава: макроструктура и рентгеноструктурный анализ Воронцов А.В., Утяганова В.Р., Шамарин Н.Н., Жуков Л.Л.	538
Свойства электронно-лучевой аддитивной технологии алюминиево-магниевого сплава Воронцов А.В., Утяганова В.Р., Шамарин Н.Н., Дмитриев А.В.	540

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Исследование характера разрушения многослойной композиции «керамическое покрытие ZrO_2 - связующий слой NiAl - подложка Ti-6Al-4V» в процессе термических испытаний Мартынов С.А., Панин А.В., Казаченок М.С., Русяев А.Н.	542
Микроструктура, деформационное поведение и механические свойства изделий из титанового сплава Ti-6Al-4V, полученных методами аддитивных технологий Панин А.В., Колмаков А.Г., Чижик С.А., Хейфец М.Л., Чугуй Ю.В.	543
Heat Treatment of Ti-6Al-4V Alloy, Manufactured by Electron-Beam Melting Pushilina N.S., Stepanova E.N., Kudiiarov V.N., Laptev R.S., Syrtanov M.S., Kashkarov E.B.	544
Структура и свойства полиметаллов системы Ti- Al осажденных путем электронно-лучевой проволоочной аддитивной технологии Утяганова В.Р., Чумаевский А.В., Калашников К.Н.	545
Коррозионные свойства стали Fe-Cr-Ni-Mn-Mo-Ti, полученной электронно-лучевой аддитивной технологией из порошковой проволоки на основе ферритной стали Утяганова В.Р., Филиппов А.В., Калашников К.Н., Шамарин Н.Н., Рубцов В.Е., Колубаев Е.А.	546
Изготовление полиметаллических образцов методом аддитивной электронно-лучевой технологии Гурьянов Д.А., Калашников К.Н., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.	547
Закономерности структурно-фазовых изменений при изготовлении полиметаллических образцов системы "медь-титан" в условиях аддитивного получения Гурьянов Д.А., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.	548
Трибологические свойства полиметаллов системы "медь-титан", полученных аддитивным методом Гурьянов Д.А., Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.	549
Investigation of Deformation Behavior of SLM Ti6Al4V Specimens Subjected to Tension Panin S.V., Eremin A.V., Burkov M.V., Byakov A.V., Pochivalov Yu.I.	550
Топографические и физико-химические характеристики сплава Ti-Ni-Nb, сформированного на TiNi подложке аддитивным методом с использованием электронного пучка Гудимова Е.Ю., Нейман А.А., Шабалина О.И., Мейснер Л.Л.	551
Аддитивное выращивание фотонных кристаллов Доненко И.Л., Доненко А.В., Лукьяненко В.А.	553
On the Fatigue Behavior of SLM Ti6Al4V Specimens: DIC and Fractographic Study Panin S.V., Eremin A.V., Burkov M.V., Lyubutin P.S., Byakov A.V., Pochivalov Yu.I.	554
Особенности направленной кристаллизации материала при электронно-лучевом аддитивном изготовлении деталей из титановых сплавов Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.	555
Формирование дефектов в структуре образцов, полученных методом электронно-лучевой аддитивной технологии Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.	556
Формирование дефектов при электронно-лучевом аддитивном изготовлении титановых образцов Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.	557
Получение образцов из стали и титанового сплава методом электронно-лучевой аддитивной технологии Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.	558
Взаимосвязь энергетического воздействия на образцы стали 12X18H9T и полученной структуры при электронно-лучевом аддитивном получении Гусарова А.В., Хорошко Е.С., Чумаевский А.В.	559
Механические свойства и структура титановых образцов, полученных при различных параметрах режимов электронно-лучевой аддитивной технологии Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.	560
Влияние структуры образцов сплава втб, полученных методом электронно-лучевого производства на механические свойства Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.	561
Формирование дефектов при аддитивном изготовлении полиметаллических образцов системы медь-алюминий Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.	562
Образование дефектов при изготовлении полиметаллов медь-титан электронно-лучевым методом Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.	563
Закономерности формирования дефектов при аддитивном электронно-лучевом производстве полиметаллических образцов Хорошко Е.С., Гусарова А.В., Чумаевский А.В.	564

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Структурно-фазовое состояние покрытий из медно-цинкового сплава, сформированных на поверхности алюминиевого сплава методом фрикционной перемешивающей обработки Чумаевский А.В., Гусарова А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А., Иванов А.Н.	565
Формирование металлических композиционных материалов гибридным аддитивно-термомеханическим методом Чумаевский А.В., Калашников К.Н., Калашникова Т.А., Гусарова А.В.	567
Оптимизация технологических параметров волочения при получении филаментов из титанового сплава ВТ6 Попелюх А.И., Тюрин А.Г., Руктуев А.А., Смирнов А.И., Рашковец М.В.	569
Структурные изменения приповерхностной области в результате воздействий НСЭП вблизи порога плавления TiNi Нейман А.А., Семин В.О., Мейснер Л.Л., Гудимова Е.Ю.	571
Обеспечение точности изготовления филаментов для аддитивного производства изделий методом электроннолучевого оплавления Янпольский В.В., Тюрин А.Г., Руктуев А.А.	572
Development of Electron-Beam Equipment and Technology of Layer Welding of the Wire in the Conditions of Additive Technologies Fedorov V.V., Klimenov V.A., Batranin A.V., Pardeep Ranga	574
Surface Modification of Selective Laser Melted Ti-6Al-4V Parts by Ultrasonic Impact Treatment and Electron Beam Irradiation Sinyakova E.A., Panin S.V., Teresov A.D.	575
Влияние импульсной электронно-пучковой обработки на микроструктуру композита TiC/Ti-6Al-4V, полученного методом прямого лазерного осаждения Синякова Е.А., Панин А.В., Панин С.В.	579
Исследование механизмов деформации и разрушения при статическом и циклическом растяжении сплавов на основе никелида титана после обработки низко-энергетическим высокоточным электронным пучком Мейснер С.Н., Власов И.В.	580

Секция 8. Иерархическая организация объектов в геодинатике

Effect of Pre-Strain Rolling Path on Abnormal Grain Growth in Friction-Stir Welded Al-Mg-Si Alloy Vysotskiy I., Malopheyev S., Mironov S., Kaibyshev R.	582
Formation of Ultrafine-Grained Structure in Al-Mg-Mn-Zr Sheets by Severe Plastic Deformation and Subsequent Rolling Vysotskiy I., Malopheyev S., Mironov S., Kaibyshev R.	583
Tensile Behavior of Friction-Stir Welded Al-Mg-Si Alloy Vysotskiy I., Malopheyev S., Mironov S., Kaibyshev R.	584
Повышение свойств медного электрического контакта за счет его обработки плазмой, сформированной при электрическом взрыве фольги серебра с навеской порошка оксида цинка Романов Д.А., Московский С.В., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Соснин К.В., Филяков А.Д.	585
Исследование электровзрывных циркониевых покрытий, сформированных на поверхности титановых имплантатов Соснин К.В., Романов Д.А., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Филяков А.Д., Будовских Е.А.	587
Влияние сварки модулированным током на структурно-фазовое состояние стали аустенитного класса 12X18H10T Смирнов А.Н., Попова Н.А., Никоненко Е.Л., Абабков Н.В., Князьков К.В., Конева Н.А.	588
Влияние параметров импульсно-дуговой наплавки с подогревом электродной проволоки на структуру и свойства наплавленных слоев Крампит М.А., Кузнецов М.А., Данилов В.И., Крампит А.Г., Шляхова Г.В.	589
Структуру и свойства поверхностных слоев стали 12X18H9T после легирования бором и Me(Cr, Ni, Fe) при электронно-лучевой обработке Бушуева Е.Г., Рябинкина П.А., Батаев В.А.	591
Формирование структур зоны термического влияния неразъемного соединения, полученного автоматической сваркой под слоем флюса порошковой проволокой с термитным наполнителем Абашкин Е.Е., Жилин С.Г., Комаров О.Н.	593

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Комплексное исследование механических свойств и структурно-фазового состава высокопрочных лазерных сварных соединений алюминиевого сплава 1420.	
Маликов А.Г., Оришич А.М., Карпов Е.В.	595
Резка алюминиевых сплавов излучением импульсно-периодического CO₂-лазера с модуляцией добротности в условиях развитого испарения материала	
Шулятьев В.Б., Оришич А.М.	597
Влияние режимов сварки трением с перемешиванием на структуру и механические свойства сплава CoCrFeNiMn-0.9%С	
Шайсултанов Д.Г., Степанов Н.Д., Высоцкий И.В., Жеребцов С.В.	599
Сравнение прочностных характеристик металла шва со слоистой структурой, полученного сваркой трением с перемешиванием, с характеристиками послойно наплавленного металла	
Калашникова Т.А., Утяганова В.Р., Калашников К.Н.	601
Исследование возможности получения сплава «WC - Ni₃Al» при реализации электронно-лучевой наплавки вне вакуума	
Крылова Т.А., Чумаков Ю.А., Домаров Е.В., Корчагин А.И.	602
Manufacture of Aluminum-Steel Bimetal by Friction Stir Welding	
Eliseev A.A., Rubtsov V.E.	603
Процесс дугового прототипирования с предварительным подогревом проволоки	
Крампит М.А., Кузнецов М.А., Крампит А.Г., Зеленковский А.А.	604
Влияние скорости подачи на качество биметалла титан-алюминий, полученного сваркой трением с перемешиванием	
Ермакова С.А., Елисеев А.А., Рубцов В.Е.	606
Гибридная лазерно-дуговая сварка стали 12X18H10T: структура и микротвердость металла шва	
Воронцов А.В., Калашникова Т.А., Дмитриев А.В.	607
Структура и механические свойства металла шва стали 12X18H10T, полученного методом гибридной лазерно-дуговой сварки	
Воронцов А.В., Калашникова Т.А., Дмитриев А.В.	609
Особенности формирования зон термического влияния лазерного сварного соединения низкоуглеродистой феррито-перлитной стали	
Деревягина Л.С., Гордиенко А.И., Оришич А.М., Маликов А.Г., Сурикова Н.С.	611
Влияние фрикционной перемешивающей обработки на структурно-фазовое состояние никелида титана	
Миронов Ю.П., Лотков А.И., Гришков В.Н., Рубцов В.Е., Белобородов В.А.	613
Закономерности деформации и разрушения неразъемных соединений стали 09Г2С, полученных методом гибридной лазерной сварки	
Гурьянов Д.А., Воронцов А.В., Чумаевский А.В.	615
Взаимопроникновение вещества, как фактор увеличения сцепления бетонов в сборно-монолитных конструкциях	
Иванов Д.А., Молодин В.В.	616
Экспериментальная проверка точных решений нелинейного дифференциального уравнения для задач зимнего бетонирования	
Молодин В.В., Чиркунов Ю.А., Лазарев А.А.	618
Одностадийная технология изготовления полистиролбетонных изделий	
Васенков Е.В., Молодин В.В.	620
Управление структурой и свойствами наплавленных покрытий модифицированием мелкогазными композиционными порошками расплава в режиме низкочастотной модуляции тока	
Сараев Ю.Н., Безбородов В.П., Перовская М.В., Семенчук В.М.	622
Control of Structure and Properties of Deposited Wear-Resistant Coatings by Modification of the Melt of the Low-Frequency Modulation Take	
Saraev Y.N., Bezborodov V.P., Perovskaya M.V., Semenchuk V.M.	624
Закономерности трибологического поведения алюминиевых сплавов при адгезионном трении в условиях высоких нагрузок и сложной конфигурации контртела	
Чумаевский А.В., Гусарова А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А., Иванов А.Н.	628
Закономерности трибологического поведения алюминиевых сплавов при адгезионном трении с внедрением ультразвука в зону трения	
Чумаевский А.В., Гусарова А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А., Иванов А.Н.	629

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Механические свойства и адгезия медно-цинковых покрытий, сформированных на поверхности алюминиевого сплава методом фрикционной перемешивающей обработки Чумаевский А.В., Гусарова А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А., Иванов А.Н.	630
Циклическая прочность неразъемных соединений, полученных методом гибридной лазерной сварки из стали 12X18H10T Иванов А.Н., Гусарова А.В., Чумаевский А.В., Жуков Л.Л., Белобородов В.А.	632
Сканирующая туннельная микроскопия подложки из стали 09Г2с после испытания на ударную вязкость в составе композиции «подложка– покрытие» и ее механические свойства Панин В.Е., Кузнецов П.В., Гальченко Н.К.	633

Секция 9. Иерархически организованные структуры в моле-кулярной биологии

Комбинированный вычислительный подход для компьютерного моделирования оползневых явлений Малинникова О.Н., Трофимов В.А., Шиповский И.Е., Wen-Jie Xu,	635
Закономерности излучения акустической эмиссии при внешнем иницировании динамического срыва Остапчук А.А.	637
Упругие деформации на границе раздела при учете механических свойств и размеров Чертова Н.В.	638
Деформационные процессы полиминеральных участков кварц-пиритового состава (габризлевское рудопроявления) Лычагин Д.В., Зырянова Л.А., Бибко А.А.	640
О возможности управления техногенными воздействиями сейсмоопасных деформаций в зонах активных тектонических разломов Ружич В.В., Псахье С.Г., Шилько Е.В.	641
Параметризация слабых сейсмических событий на коробковском месторождении курской магнитной аномалии Беседина А.Н.	643
Исследование процесса подготовки сейсмических событий с помощью анализа низкочастотного сейсмического шума Беседина А.Н., Ряховский И.А., Павлов Д.В.	645
Режим деформирования водонасыщенного коллектора по данным прецизионного мониторинга уровня подземных вод Кабыченко Н.В., Горбунова Э.М., Беседина А.Н.	646
Автосолитонная концепция медленных деформационных волн в земле Макаров П.В.	648
Автосолитоны в геосредах Макаров П.В., Перышкин А.Ю.	649
Компьютерное моделирование геотектонических процессов на территории сибирской платформы и её обрамления Ахметов А.Ж., Смолин И.Ю., Макаров П.В., Перышкин А.Ю.	650
Этапы формирования разломной зоны при сдвиге по простиранию. кинематика блочной структуры Бакеев Р.А., Стефанов Ю.П., Кочарян Г.Г.	652
Расчет гравитационных напряжений в слое геосреды Бакеев Р.А., Стефанов Ю.П.,	653
Учет сферичности при численном моделировании процессов деформации в земной коре Стефанов Ю.П., Бакеев Р.А., Суворов В.Д., Мельник Е.А.	654
Особенности развития рельефа складчато-надвиговых поясов Татаурова А.А., Стефанов Ю.П.	655
Влияние структурной иерархии и первоначальной анизотропии на напряженно-деформированное состояние геоконструкций Чанышев А.И., Абдулин И.М., Белоусова О.Е.	657
Адсорбция гемостатического средства наночастицами $AlOOH$ и $Fe(OH)_2$: молекулярная динамика Цуканов А.А., Мамонова Е.В., Гаврилова Л.О., Садовой М.А.	658
Эволюция взглядов на физическую природу медленных деформационных возмущений в геосредах Макаров П.В., Перышкин А.Ю.	660

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Секция 10. Материалы и реагенты для повышения нефтеотдачи, транспортировки нефти и переработки углеводородного сырья

- Изменения иерархически организованных структур нефти в процессе ферментативной биодеструкции**
Сваровская Л.И., Алтунина Л.К. 663
- Разработка полимерного каркаса как основы для создания тканеинженерного сосудистого протеза**
Великанова Е.А, Матвеева В.Г., Кривкина Е.О., Севостьянова В.В., Ханова М.Ю.,
Кудрявцева Ю.А., Антонова Л.В. 665
- Vibron Dressing in the Three Paralell Macromolecular Chain Structure**
Cevizovic D., Ivic Z., Galovic S., Chizhov A., Reshetnyak A. 667

Секция 11. Разработка оборудования для формирования материалов с иерархически организованной структурой и приборов для исследования их структуры, свойств и деформационного поведения

- Влияние химико-термической обработки на структурно-фазовое состояние аустенитного сплава**
Попова Н.А., Никоненко Е.Л., Ерболатова Г.У., Калашников М.П., Никоненко А.В. 669
- Исследование возможности регистрации динамических нагрузок с помощью волоконно-оптических датчиков**
Аношкин А.Н., Шипунов Г.С., Воронков А.А., Никифоров А.С. 670
- Разработка трибометра для проведения трибологических испытаний в вакууме**
Жуков Л.Л., Соколов П.С., Белобородов В.А. 672

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ С
МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ, ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

Пленарные доклады

- Наноструктурированные гели и золи для физико-химических и комплексных технологий увеличения нефтеотдачи**
Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Кувшинов И.В., Стасьева Л.А., Чертенков М.В., Андреев Д.В., Карманов А.Ю. 477
- Каталитические методы в нефтедобыче и переработке нетрадиционного углеводородного сырья**
Носков А.С., Казаков М.О., Добрынкин Н.М. 478
- Новая научно-практическая доктрина в нефтегазовой геологии**
Запивалов Н.П. 479
- Парадоксы физико-химии нефтяного пласта**
Телин А.Г. 480
- Age of Chemistry in Oil and Gas Recovery**
Lakatos I., Lakatos-Szabo J., Szentes G. 481
- Переработка нефти: прошлое и настоящее**
Лавренев А.В., Булучевский Е.А., Карпова Т.Р., Непомнящий А.А., Федорова Е.Д. 482
- Научные аспекты получения функционализированного технического углерода**
Лихолобов В.А. 483
- Нелинейная мезомеханика материалов для арктических приложений**
Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Сурикова Н.С., Деревягина Л.С., Панин С.В. 484

Секция А. Физико-химические и микробиологические методы увеличения нефтеотдачи, газо-и конденсатоотдачи, в том числе для месторождений с трудно извлекаемыми запасами. Новые технологии обработки призабойной зоны нефтяных и газовых скважин. Проблемы добычи, подготовки и транспорта высоковязких и высокопарафинистых нефтей, проблемы освоения нефтегазовых месторождений Арктического региона

- Вязкоупругие жидкости для нефтедобычи**
Дмитриева З.Т. 686

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Реологические особенности водонефтяных эмульсий с добавками полимеров Манжай В.Н., Фуфаева М.С.	687
Изучение совместных отложений гидрата метана и компонентов нефти методом «холодного стержня» Стопорев А.С., Манаков А.Ю.	688
Способ оценки реологических свойств вязкоупругих криогелей Фуфаева М.С., Манжай В.Н., Алтунина Л.К.	689
Особенности состава добытых и остаточных тяжелых нефтей усинского месторождения Чуйкина Д.И., Петренко Т.В., Стахина Л.Д., Савиных Ю.В.	690
Контроль за разработкой месторождения по изменению состава добываемой нефти после применения комплексных технологий Стахина Л.Д., Савиных Ю.В., Чуйкина Д.И.	691
Применение кислотной нефтewытесняющей композиции на скважине с трещиной гидроразрыва и в карбонатном пласте с естественной трещиноватостью Пеньковский В.И., Корсакова Н.К., Алтунина Л.К., Кувшинов В.А.	692
Опыт применения химических методов увеличения нефтеотдачи на пермо-карбоновой залежи высоковязкой нефти усинского месторождения Кувшинов И.В., Алтунина Л.К., Кувшинов В.А.	693
Риски загрязнения нефтью и нефтепродуктами арктических территорий Алексеева М.Н., Сваровская Л.И., Ященко И.Г.	694
Гравиметрический и газохроматографический методы определения содержания парафинов Суховерхов С.В., Логвинова В.Б.	695
Моделирование процесса гравитационного разделения асфальтенов в пласте Охотникова Е.С., Барская Е.Е., Ганеева Ю.М., Юсупова Т.Н., Тимиргалиева А.Х.	696
Влияние состава и структуры высокомолекулярных компонентов нефти из карбонатных коллекторов на ее температурно-реологические свойства Тимиргалиева А.Х., Барская Е.Е., Охотникова Е.Е., Ганеева Ю.М., Юсупова Т.Н.	697
Газовые гидраты в нефтяных дисперсиях: обзор исследований лаборатории клатратных соединений их со ран Манаков А.Ю., Стопорев А.С., Адамова Т.П., Скиба С.С., Сагиддулин А.К., Сизиков А.А., Струков Д.А., Стрелец Л.А., Сваровская Л.И., Алтунина Л.К.	698
Влияние ультразвуковой обработки и нефтяных смол на кристаллизацию высокомолекулярных углеводородов Морозова А.В., Волкова Г.И.	699
Исследование влияния условий ультразвукового воздействия на разрушение устойчивых водонефтяных эмульсий Волкова Г.И., Юдина Н.В.	700
Азотсодержащие основания асфальтенов нефти усинского месторождения Герасимова Н.Н., Сагаченко Т.А., Мин Р.С.	701
Низкотемпературные наноструктурированные гелеобразующие композиции для ограничения водопитока Козлов В.В., Алтунина Л.К., Стасьева Л.А., Рождественский Е.А., Кувшинов В.А.	702
Влияние присадки на свойства модельных водонефтяных эмульсий Саврасова Е.А., Прозорова И.В., Юдина Н.В.	703
Влияние ингибитора на низкотемпературные и реологические свойства высокопарафинистой нефти Шаронова А.Е., Шишмина Л.В.	704
Нанодобавки для увеличения теплопроводности пластов в прибойной зоне паронагнетательных скважин Руненков А.В.	705
Влияние кислотной композиции гбк и пластовой микрофлоры на состав и эффективность вытеснения нефти усинского месторождения Щербакoва А.Г., Овсянникова В.С., Алтунина Л.К.	706
Термобарические исследования многофункциональной химической композиции на основе пав Филатов Д.А., Рождественский Е.А., Алтунина Л.К.	707
Влияние нефтewытесняющей композиции на основе пав на окисление высоковязкой высокопарафинистой нефти Филатов Д.А., Овсянникова В.С.	708

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Влияние условий формирования водонефтяных эмульсий на энергию активации вязкого течения Небогина Н.А., Юдина Н.В.	709
Исследование фильтрационных характеристик и нефтевытесняющей способности кислотной композиции для увеличения нефтеотдачи Чернова У.В., Шолидодов М.Р., Козлов В.В., Алтунина Л.К.	710
Применение физических методов борьбы с отложениями асфальтосмолопарафиновых веществ Валиев Д.З., Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф.	711
Анализ закономерностей изменения физико-химических свойств нефтей в зависимости от глубины залегания Ященко И.Г., Крупицкий В.В., Полищук Ю.М.	712
Сонохимический модуль перекачки высоковязкой нефти Муллагаев М.С., Муллагаев Р.М., Волкова Г.И.	713
Особенности реологических измерений нефтяных систем Стрелец Л.А.	714
Внутрипластовое облагораживание высоковязкой нефти с использованием нефтерастворимого катализатора на основе никеля Алиев Ф.А., Вахин А.В.	715
Материальный баланс органического вещества доманиковых отложений при термическом воздействии Онищенко Я.В.	716
Особенности состава газовых залежей северных и арктических районов западной сибери Новиков Д.А., Дульцев Ф.Ф., Черных А.В., Фурсенко Е.А.	717
Исследование свойств и особенностей состава нефтей северных территорий западной сибери Красноярова Н.А., Чуйкина Д.И., Серебренникова О.В., Дорофеева Н.В.	718
Закономерности распределения углеводородных и гетероатомных соединений в рассеянном органическом веществе севера западной Сибери Красноярова Н.А., Серебренникова О.В., Кульчаковская Е.В.	719
Моделирование струйного размыва донных отложений затопленной турбулентной струей Никульчиков А.В., Никульчиков В.К., Солоненко В.А.	720
Исследование причин образования стойких эмульсий на установке подготовки нефти Ковальчук А.А., Косицына С.С., Бурюкин Ф.А.	721
Тестирование пав для методов увеличения нефтеотдачи в условиях карбонатных пластов с высокой минерализацией и жесткостью пластовой воды Ломпик В.А., Бурюкин Ф.А., Дадакин Н.М.	722
Преобразование тяжелой нефти в присутствии наноразмерного оксида железа (II, III) под воздействием водяного пара Ситнов С.А., Мухаматдинов И.И., Шмелева Э.И., Долгих С.А.	723
Состав асфальтенов мазута усинской нефти Чешкова Т.В., Арышева А.Д.	724
Новая конструкция оборудования для ликвидации негерметичности нефтяных и газовых скважин Ваганов Р.А., Агровиченко Д.В., Жуков М.В.	725
Разработка и испытание новых меченных красителем полиамфолитных трассеров для исследования межскважинного пространства м/р восточный Молдабек Сигитов В.Б., Гусенов И.Ш., Сабилов Р.А., Ибрашев К.Н., Кудайбергенов С.Е.	726
Вариации состава извлекаемой нефти угутского месторождения Ханты-Мансийского автономного округа Муравская Ю.А., Туров Ю.П., Гузняева М.Ю.	727
Quenched Polyampholytes for Polymer Flooding Mukhametgazy N., Gussenov I., Kudaibergenov S.	728
Реокинетика фазовых превращений нефтяных и гелеобразующих систем Кожевников И.С., Богословский А.В., Алтунина Л.К.	729
Изоляция водопритока в нефтяных скважинах методом газодиффузионного воздействия Воробьев А.К., Черкасов А.В., Кодолов В.В., Курбатов А.В.	730
Влияние условий формирования водонефтяной эмульсии на динамику процесса отстаивания Кузьменко Е.А., Мойзес О.Е., Марченко М.Е.	731
Исследование фазовых переходов парафинов и индивидуальных n-алканов в нефти оптическими методами Курьяков В.Н., Муратов А.Р., Иванова Д.Д.	732

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Влияние обработки кислотной композицией гбк нагнетательной скважины усинского месторождения на добычу нефти и свойства добываемых флюидов Овсянникова В.С., Рождественский Е.А., Стрелец Л.А, Кувшинов И.В., Алтунина Л.К.	733
Уточнение свойств псевдокомпонента гидродинамической модели, имитирующего воду в пластовых условиях Токмакова П.Г.	734
Секция В. Новые нетрадиционные технологии подготовки, транспорта и переработки нефти и газа. Экологические аспекты добычи, подготовки и транспорта нефти и газа: проблемы и решения.	
Предотвращение образования газовых гидратов смешанными ингибиторами спирт–соль Мендгазиев Р.И., Семенов А.П., Стопорев А.С., Винокуров В.А.	736
Состав продуктов крекинга нефтяных мальтенов в присутствии бутилбромида Певнева Г.С., Воронежская Н.Г., Свириденко Н.Н., Головкин А.К.	737
Катализаторы гидродесульфирования, приготовленные механоактивацией молибденита в криогенных условиях Микубаева Е.В., Уймин М.А., Майков В.В., Журавков С.П., Восмерилов А.В., Федущак Т.А.	738
Усовершенствование процесса гидроочистки дизельного топлива Баклашкина К.А.	739
Влияние способа введения рения в цеолит на динамику его дезактивации при облагораживании прямогонного бензина Величина Л.М., Восмерилов А.В.	740
Зависимость дуосол-процесса от качественных характеристик компонентов «селекто» Валетова Н.Б., Семеныхева Л.Л., Занозина В.Ф., Фаерман В.И., Фомин О.А., Носова Ю.Е., Акимов А.В.	741
Крекинг мальтенов с добавкой WC/Ni-Cr Воронежская Н.Г., Певнева Г.С., Свириденко Н.Н., Головкин А.К.	742
Анализ многолетней динамики вегетационного индекса растительности на объектах нефтегазового комплекса с применением спутниковых данных Перемитина Т.О., Яценко И.Г.	743
Структурно-групповые характеристики смол и асфальтенов остатков тяжёлых нефтей различного типа Копытов М.А., Головкин А.К.	744
Термические превращения смолисто-асфальтеновых компонентов нефтяного остатка Копытов М.А., Головкин А.К.	745
Влияние природы цинка на селективность образования аренов из пропан-бутановой фракции на модифицированных цеолитных катализаторах, активированных плазмой Джалилова С.Н., Ерофеев В.И., Ерофеев М.В., Рипенко В.С.	746
Агрегативная устойчивость сверхтяжелой нефти, природного асфальтита и продуктов их конверсии в сверхкритической воде Антипенко В.Р., Петренко Т.В., Федяева О.Н., Востриков А.А.	747
Особенности состава и свойств нефтей центральной части восточной сибирей Ахмедова А.Р., Серебренникова О.В., Шиганова О.В.	748
Экологические риски воздействия сжигания попутного нефтяного газа на окружающую природную среду Алексеева М.Н., Яценко И.Г.	749
Перспективные направления переработки отложений асфальтосмолопарафиновых веществ в нефтяной отрасли Валиев Д.З., Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф.	750
Превращение природного и попутного нефтяного газов на модифицированных цеолитных катализаторах Восмерилов А.А., Восмерилова Л.Н., Барбашин Я.Е., Восмерилов А.В.	751
Сравнительная характеристика жидких продуктов сверхкритической флюидной экстракции горючих сланцев дмитриевского и чим-лоптугского месторождений Петров А.В., Байшибилова В.Т., Коваленко Е.Ю.	752
Получение мезапористых цеолитных носителей для катализаторов ароматизации метана Жарнов К.Н., Степанов А.А., Коробицына Л.Л., Восмерилов А.В.	753

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Экстракционная десульфуризация дизельного топлива с использованием ионных жидкостей Коботаева Н.С., Скороходова Т.С.	754
Биодеструктивные процессы в нефтезагрязненной глинистой почве Стрельникова Е.Б., Сваровская Л.И., Русских И.В., Серебренникова О.В.	755
Влияние условий низкочастотного акустического воздействия на стабильность водонефтяных эмульсий Лоскутова Ю.В., Юдина Н.В.	756
Исследование ингибирующей защиты магнитного поля Лоскутова Ю.В., Савельева А.В., Калистратов В.А.	757
Исследование углеводородного состава тяжелых смол пиролиза Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф., Сайфуллина М.Н., Сальманов Р.С., Азизов Д.К., Кемалов М.А.	758
Создание адгезионной добавки для стабилизирующей добавки к щебеночно-мастичному асфальтобетону Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф., Сайфуллина М.Н., Сальманов Р.С., Азизов Д.К., Кемалов М.А.	759
Модифицированные водобитумные эмульсии Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф., Сайфуллина М.Н., Сальманов Р.С., Азизов Д.К., Кемалов М.А.	760
Получение модифицированных битумных эмульсий на основе неионогенных пав Кемалов Р.А., Кемалов А.Ф., Сайфуллина М.Н., Сальманов Р.С., Азизов Д.К., Кемалов М.А., Аюпов Р.Р.	761
Применение составов криогелей для укрепления защитного глинистого слоя на курумных участках магистрального газопровода «сила сибери» Бурков П.В., Данилов И.Е.	762
Влияние первичной переработки тяжелой нефти на состав и молекулярную структуру асфальтенов Корнеев Д.С., Певнева Г.С., Головки А.К.	763
Преобразования молекулярной структуры асфальтенов в процессе их ступенчатой деструкции до 230 °С Чузлов В.А., Корнеев Д.С., Певнева Г.С., Головки А.К.	764
Влияние выбросов нефтеперерабатывающего предприятия на состав органических компонентов снежного и почвенного покровов Русских И.В., Стрельникова Е.Б., Серебренникова О.В., Кадычагов П.Б.	765
Стратегия перехода к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям каталитических процессов переработки углеводородного сырья Ивашкина Е.Н., Иванчина Э.Д.	766
Синтез и исследование катализаторов селективного гидрирования диенов в составе бензина каталитического крекинга Саломатина А.А., Перейма В.Ю., Сайко А.В., Климов О.В.	767
Прогнозирование работы установки риформинга на павлодарском НПЗ Дюсова Р.М., Сейтенова Г.Ж., Чузлов В.А., Иванчина Э.Д.	768
Влияние смол и асфальтенов на депарафинизацию нефтей сжиженным газом Можайская М.В., Певнева Г.С., Сурков В.Г., Головки А.К.	769
Производство компонентов зимнего и арктического дизельного топлива в процессе каталитической депарафинизации Быкова В.В., Белинская Н.С.	770
Закономерности выжигания полициклических ароматических углеводородов при динамической подаче воздуха в реакторы каталитического риформинга бензинов Кокшаров А.Г., Чузлов В.А., Иванчина Э.Д.	771
Влияние соотношения кобальта и никеля в катализаторах гидроочистки на эффективность удаления серы и азота Лушикова А.Е., Столярова Е.А., Климов О.В., Герасимов Е.Ю., Ларина Т.В., Чесалов Ю.А., Носков А.С.	772
Исследование устойчивости к осаждению асфальтенов высокопарафинистой нефти Петренко Т.В., Герасимова Н.Н.	773
Фракционный состав сложных структурных единиц нефтей при гидротермально-каталитическом воздействии Салих С.И.Ш., Мухаматдинов И.И.	774
Крекинг тяжелой нефти в присутствии WC/Ni-Cr Свириденко Н.Н., Головки А.К.	775

СОДЕРЖАНИЕ. Международный междисциплинарный симпозиум «Иерархические материалы: разработка и приложения для новых технологий и надежных конструкций»

Влияние условий крекинга на превращения высокомолекулярных компонентов вакуумного остатка	
Свириденко Н.Н., Акимов А.С., Головкин А.К.	776
Состав продуктов крекинга окисленных серосодержащих компонентов вакуумного газойля	
Иовик Ю.А., Кривцов Е.Б., Головкин А.К.	777
Влияние жидкого n-алкана на удаление сероводорода из метана в барьерном разряде	
Кудряшов С.В., Рябов А.Ю., Очеретько А.Н.	778
Влияние состава реакционной смеси на неокислительную конверсию метана в присутствии воды в барьерном разряде	
Кудряшов С.В., Рябов А.Ю., Очеретько А.Н.	779
Влияние твердофазных добавок на превращения асфальтенов гудрона в условиях механохимического воздействия	
Сурков В.Г., Можайская М.В., Певнева Г.С., Головкин А.К.	780
Изменение состава и структуры смол и асфальтенов высокосернистых гудронов в процессе крекинга	
Гончаров А.В., Кривцов Е.Б., Головкин А.К.	781
Фиторемедиация выщелоченного чернозема, загрязненного углеводородами	
Шаронова Н.Л., Теренжев Д.А., Фосс Л.Е., Синяшин О.Г.	782
К вопросу о нефтесорбции верхового торфа Севера РФ	
Селянина С.Б., Орлов А.С., Пономарева Т.И., Зубов И.Н.	783
Особенности структурно-группового состава масел тяжелых нефтей различного типа	
Рявкина М.К., Корнеев Д.С., Бешагина Е.В.,	784
Структурные изменения и химизм высокомолекулярных компонентов в процессе термокаталитической переработки	
Акимов А.С., Свириденко Н.Н., Алексенко В.О., Панин С.В.	785
Увеличение выхода бензиновой фракции в технологии каталитического крекинга с применением метода математического моделирования	
Назарова Г.Ю., Ивашкина Е.Н., Орешина А.А.	786
Кинетические закономерности образования производных тиофена в процессе крекинга вакуумного газойля и гудрона	
Иовик Ю.А., Гончаров А.В., Кривцов Е.Б., Головкин А.К.	787
Моделирование процесса гидрокрекинга нефтяного сырья	
Белинская Н.С., Бедарева Е.К., Иванчина Э.Д.	788
Новые подходы и технологии переработки природного газа и нефти в компоненты экологически безопасных компонентов моторных топлив	
Белый А.С.	789
Тестирование тонкодисперсных порошков из сплава вкб в качестве катализаторов GTL-процесса	
Пивовар В.А., Попок Е.В., Журавков С.П.	790
Особенности биодеструкции различных классов углеводородов в нефтезагрязненных биоценозах Монголии	
Сваровская Л.И., Алтунина Л.К., Яценко И.Г.	791

Содержание

Научное издание

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**International Workshop
«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»,**

**Международной конференции
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»,**

**VIII Всероссийской научно-практической конференции с международным
участием, посвященной 50-летию основания института химии нефти
«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»**

**в рамках
Международного междисциплинарного симпозиума
«Иерархические материалы: разработка и приложения
для новых технологий и надежных конструкций»**

**1–5 октября 2019 года
Томск, Россия**

Издание подготовлено в авторской редакции

Подписано к печати 25.09.2019 г.
Бумага для офисной техники. Гарнитура Times
Усл. печ. л. 47,7. Тираж 50 экз. Заказ № 3988

Отпечатано на оборудовании
Издательский Дом
Томского государственного университета
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36
Тел.: 8+(382-2)-52-98-49
Сайт <http://publish.tsu.ru>
E-mail: rio.tsu@mail.ru

ISBN 978-5-94621-841-2

