

# Современные проблемы наук о материалах и процессах

## **Лекция 7,8**

*Основы выбора материалов для конструкционных и функциональных приложений с учетом особенностей изготовления, обработки, выбора формы полуфабрикатов и сборки итоговой конструкции.*

КЛИМЕНОВ  
Василий Александрович  
профессор ИШНПТ ТПУ

# Содержание лекции

- Введение
- Выбор материалов и изготовление изделий
- Принципы разработки новых материалов и технологий

## Дополнительная литература

- Lawrence E. Murr, Sara M. Gaytan, Diana A. Ramirez, et al Metal Fabrication by Additive Manufacturing Using Laser and Electron Beam Melting Technologies //J. Mater. Sci. Technol., 2012, 28(1), 1-14
- Anton Zhukov, Boris Barakhtin, Olga Vasil,eva, Pavel Kuznetcov Features of deformation of bearing plates in a clip model manufactured by direct metal laser-sintering of a steel powder // Materials Today Proceedings, <https://doi.org/10.1016./j.matpr.2019.07.223>



# ВВЕДЕНИЕ

# Конструкционные материалы

Изготовление деталей машин, конструкций,  
работающих под нагрузкой

Металлы

Неметаллы

Композиты

**Черные**  
Стали, чугуны

**Цветные**  
Титан, медь,  
никель и др.

Пластмассы,  
керамика,  
стекло,  
резина, дерево

На металлич.,  
керамич.,  
полимерной  
основе

## Определение функционального материала. Основные понятия.

Радиационная  
стойкость

Биологическая  
совместимость

Оптические  
свойства

**Функциональные материалы** - это материалы, обладающие определенным уровнем физико-химических и механических свойств, которые в совокупности обеспечивают использование этих материалов в определенном устройстве, приборе или конструкции.

Электрофизи-  
ческие  
свойства

Магнитные  
свойства

**«Умные» материалы**

- устроены таким образом, чтобы выполнить самоконтролируемое «умное» действие, подобное действию живого организма, способного «думать», принимать решение и совершать действие.

# **Конструкционные и функциональные материалы в машиностроении**

Необходимость решения важнейших технических задач, связанных с экономным расходом материалов для современной техники, обуславливает дальнейшее развитие науки о материалах.

Крупными достижениями в науке и практике материаловедения ознаменовался XX век:

- были созданы высокопрочные материалы для деталей и инструментов;
- разработаны композиционные и керамические материалы, триплекс и ситаллы;
- открыты сверхпроводники, применяющиеся в энергетике и других отраслях техники;
- созданы материалы с помощью нанотехнологий;
- широкое применение получили полимерные материалы и др.;
- совершенствовались способы упрочнения деталей пластическим деформированием, термической и химико-термической обработкой.



Выбор материалов и изготовление изделий

# Свойства материалов, определяющие их конструирование

Материал	Хорошие свойства	Удовлетворительные свойства
<b>МЕТАЛЛЫ</b>	Твердые ( $E \approx 100 \text{ ГН м}^{-2}$ )	Пр. текучести (чистый, $\sigma_T \approx 1 \text{ МН м}^{-2}$ ) сплав
Высокие $E, K_{Ic}$	Пластичные ( $\epsilon_f \approx 20\%$ )	Твердость ( $H \approx 3\sigma_T$ ) → сплав
Низкий $\sigma_T$	Вязкие ( $K_c$ ) $> 50 \text{ МН м}^{-3/2}$	Усталость ( $\sigma_e = \frac{1}{2}\sigma_T$ )
	Высокая темп. плавления ( $T_m \approx 1000 \text{ С}$ )	Коррозионная стойкость → покрытия
<b>КЕРАМИКА</b>	Жесткие ( $E \approx 200 \text{ ГН м}^{-2}$ )	Очень низкая вязкость ( $K_c \approx 2 \text{ МН м}^{3/2}$ )
Высокие $E, \sigma_T$	Очень высокие твердость и	Пластичность → порошковые методы
Низкий $K_{Ic}$	Пр. текучести ( $\sigma_T > 3 \text{ ГН м}^{-2}$ ) Высокая темп. плавления ( $T_m \approx 2000 \text{ С}$ ) Коррозионностойкие, средней плотности	
<b>ПОЛИМЕРЫ</b>	Пластичные	Низкая жесткость ( $E \approx 2 \text{ ГН м}^{-2}$ )
Нормальные $\sigma_T, K_{Ic}$	Коррозионностойкие	Пр. текучести ( $\sigma_T = 2-100 \text{ МН м}^{-2}$ )
Низкий $E$	Низкой плотности	Низкая температура ( $T_G = 100 \text{ С}$ ) → ползучесть Вязкость, часто низкая ( $K_c \approx 1 \text{ МН м}^{-3/2}$ )
<b>КОМПОЗИТЫ</b>	Жесткие ( $E > 50 \text{ ГН м}^{-2}$ )	Пластичность
Высокие $E, \sigma_T, K_{Ic}$	Прочные ( $\sigma_T \approx 200 \text{ МН м}^{-2}$ )	Дорогие
Дорогие	Вязкие ( $K_c > 20 \text{ МН м}^{-3/2}$ ) Усталостная прочность, коррозионностойкие, низкая плотность	Ползучесть (полимер-матричные композиты)

Адаптировано из M.F. Ashby, D.R. Jones, Engineering Materials. V. I, University of Cambridge, UK

# Выбор материала с применением диаграмм Эшби

- **Выбор материала** - это шаг в процессе проектирования любого физического объекта. В контексте дизайна продукта основная цель выбора материала - минимизировать затраты при достижении целей производительности продукта. Систематический выбор лучшего материала для конкретного применения начинается со *свойств и стоимости* материалов-кандидатов. При выборе материала часто используется индекс материала или индекс производительности, соответствующий желаемым свойствам материала. Например, теплозащитный материал или экран должны иметь плохую теплопроводность, чтобы минимизировать теплопередачу при заданной разнице температур. Крайне важно, чтобы конструктор хорошо знал свойства материалов и их поведение в рабочих условиях. *Важные характеристики материалов:* прочность, долговечность, гибкость, вес, устойчивость к нагреву и коррозии, способность к литью, сварке или закалке, обрабатываемость, электропроводность и т.д.
- **График Эшби**, названный в честь Майкла Эшби из Кембриджского университета, представляет собой диаграмму рассеяния, которая отображает два или более свойств многих материалов или классов материалов. Эти графики полезны для сравнения соотношения между различными свойствами. Для примера жесткой / легкой детали, описанной выше, модуль Юнга будет находиться на одной оси, а плотность - на другой оси, с одной точкой данных на графике для каждого материала-кандидата. На таком графике легко найти не только материал с наибольшей жесткостью или наименьшей плотностью, но и материал с наилучшим соотношением  $E / \rho$ .

# Методология выбора материала и проектирования изделия



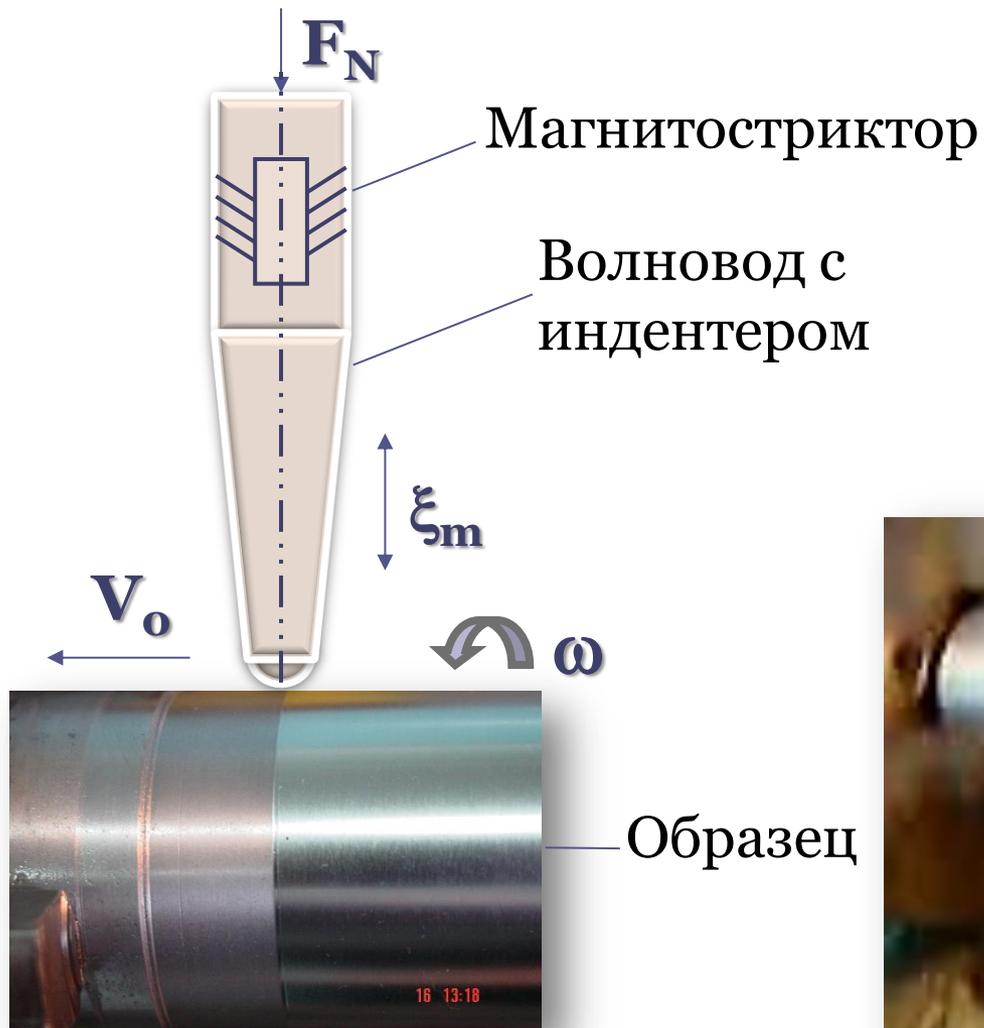
Адаптировано из M.F. Ashby, D.R. Jones, Engineering Materials. V. I, University of Cambridge, UK

# Продолжение

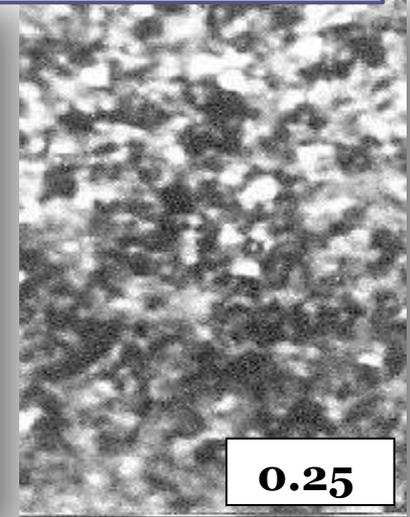
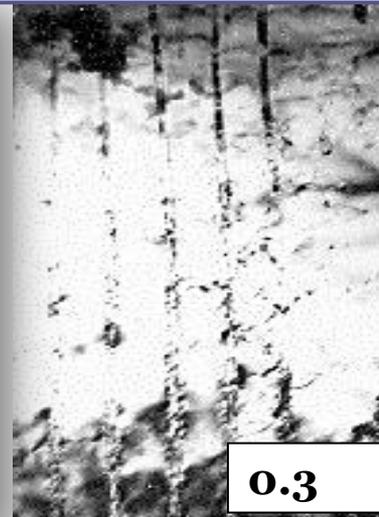
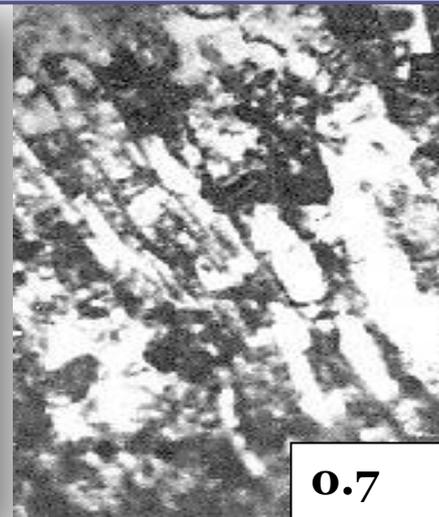


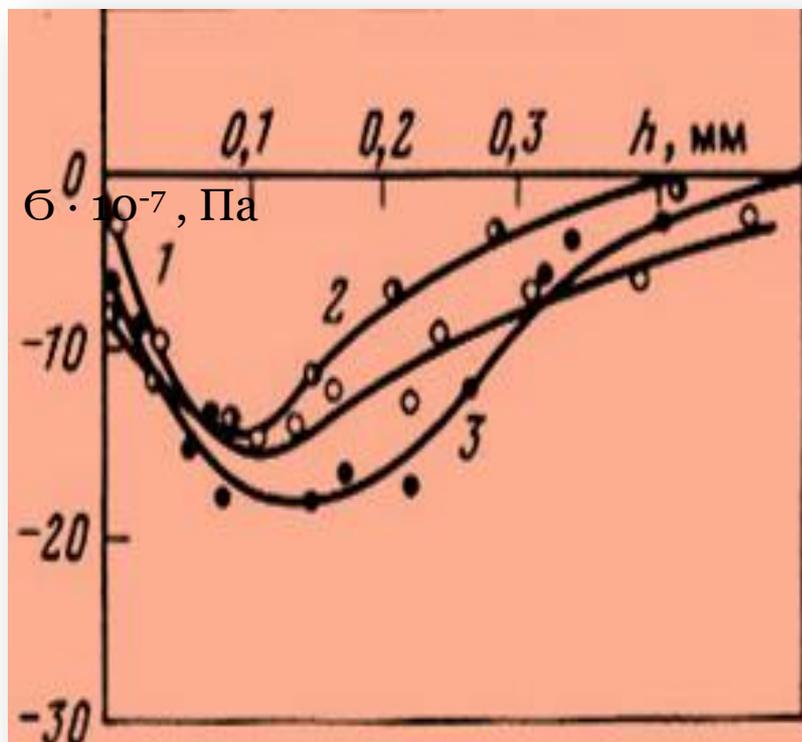
# Методы повышения прочности





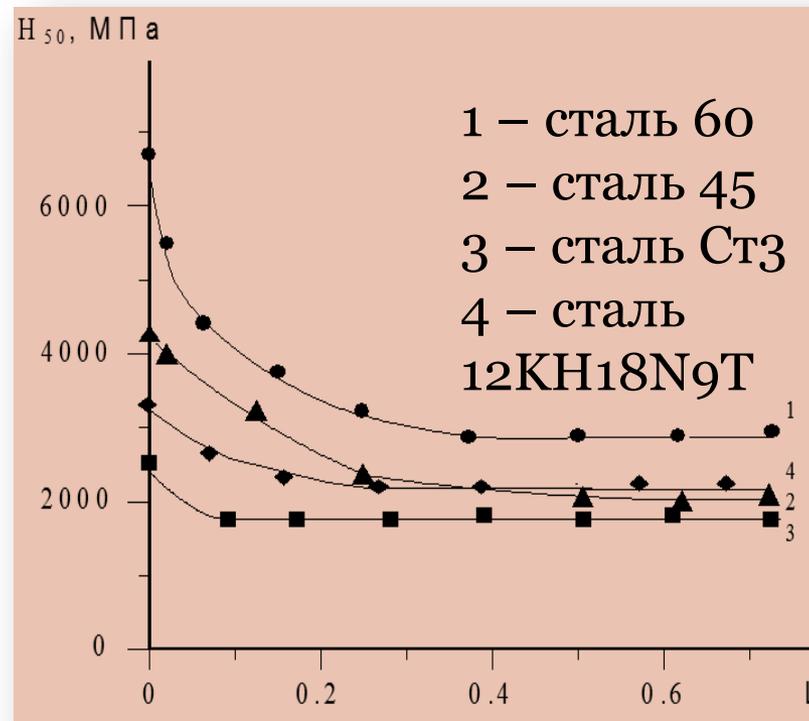
Металлографическое • Электронно-микроскопические  
изображения стали 60 после УФО





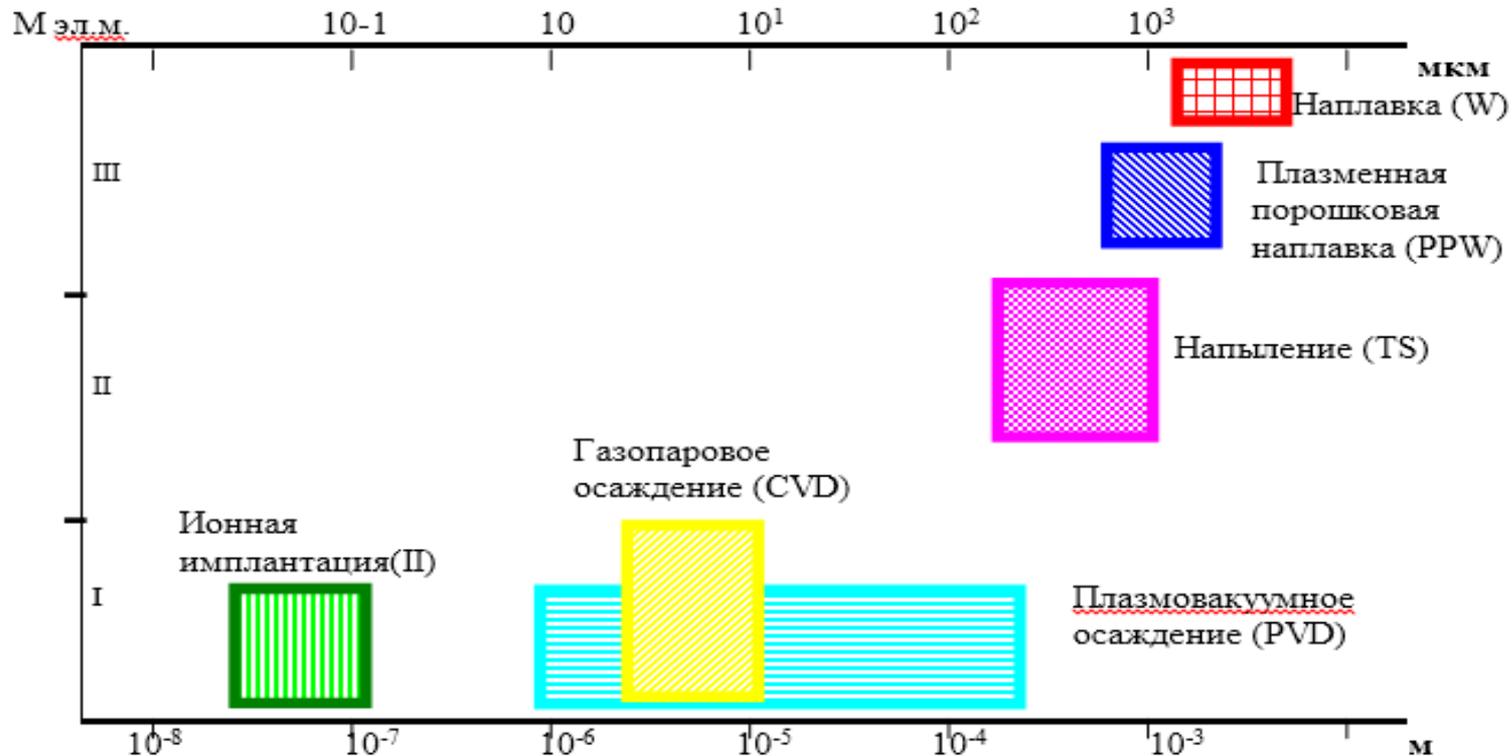
1 – после обработки алмазными инструментом, 2, 3 – после УФО

Распределение остаточных напряжений



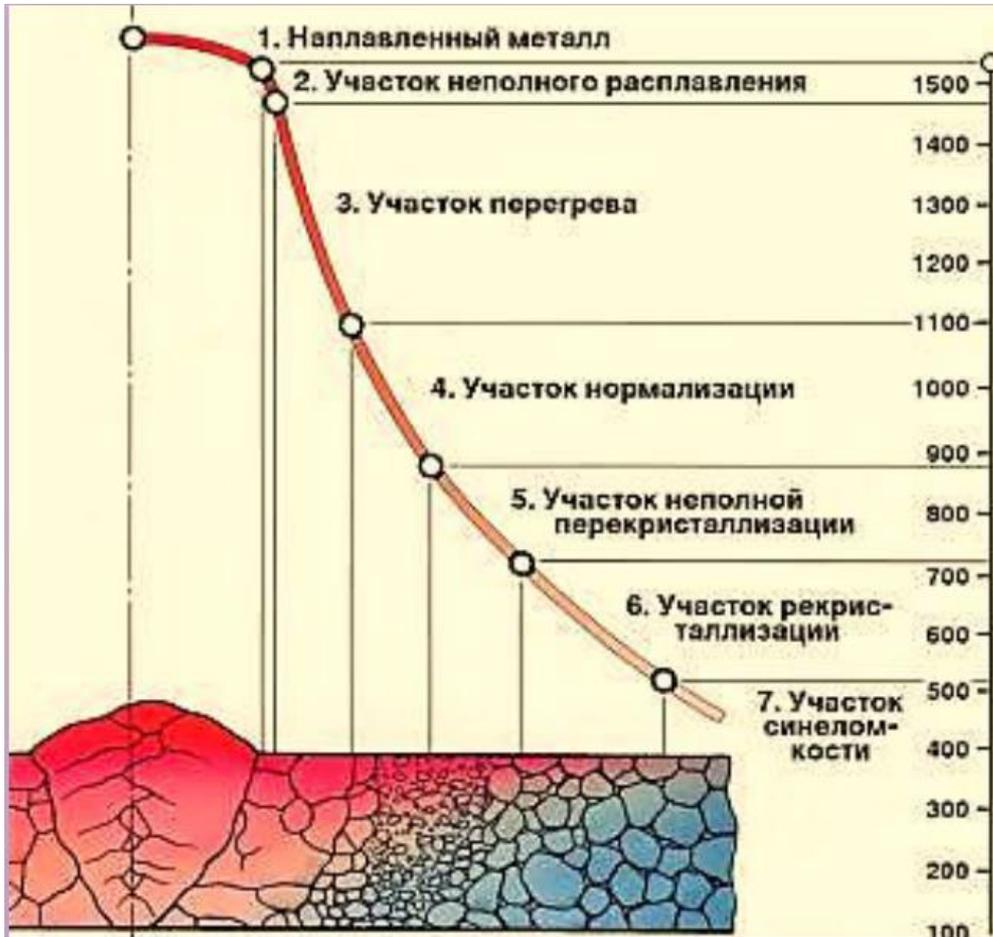
Распределение микротвердости

# Методы нанесения покрытий

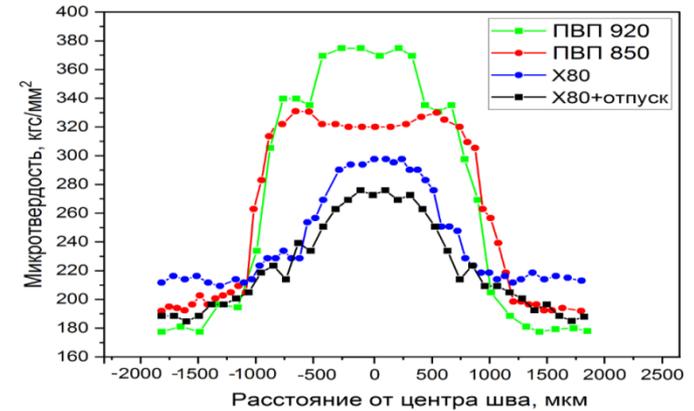


Толщина покрытий и масштабы элементарной массы осаждаемого материала различными методами напыления покрытий: I - атомы, ионы, кластеры; II - частицы порошка или расплава; III - струя расплавленного электродного металла

# Строение сварного шва и его свойства



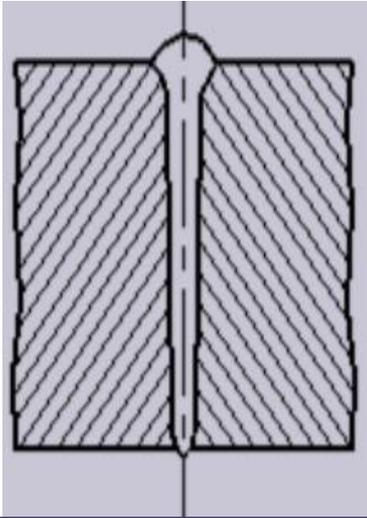
Макроструктуры сварных швов



Графики распределения микротвердости в сварных швах сталей с разным исходным структурным состоянием

По данным Панюхиной А.Д.

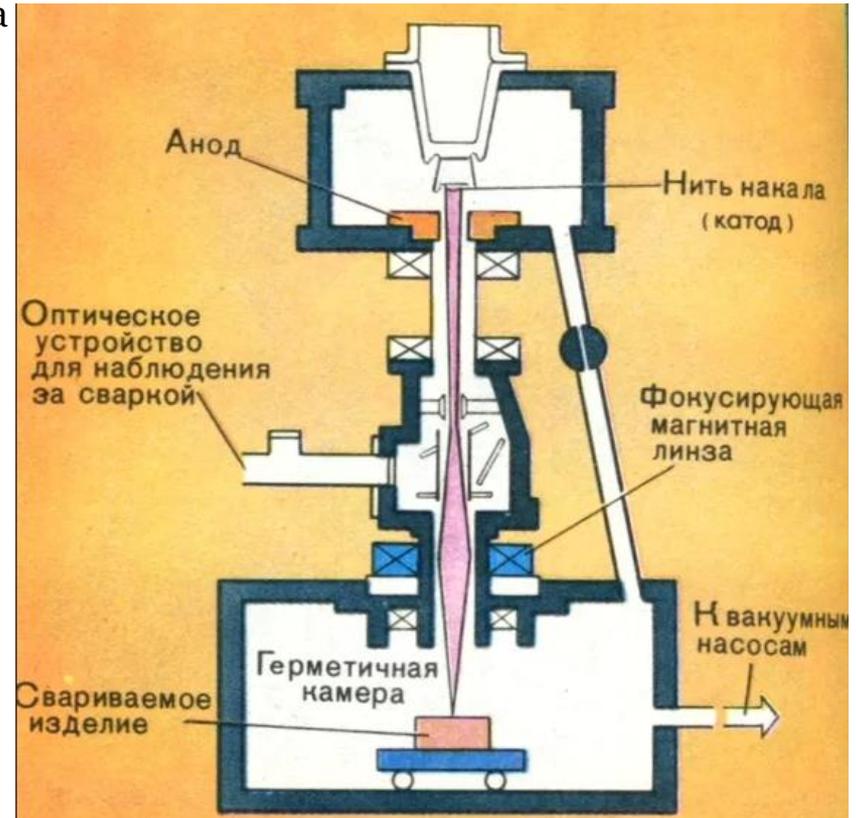
# Сварка высокоэнергетическим источником



Форма сварного шва при

- Электронно-лучевая сварка
- Плотность мощности пучка электронов  $10^5$ - $10^7$  Вт/см<sup>2</sup>
- Испарение металла
- Поверхность ванны прогибается
- В жидком металле формируется пародинамический канал на всю глубину ванны
- Канал образуется давлением отдачи испаряемого металла

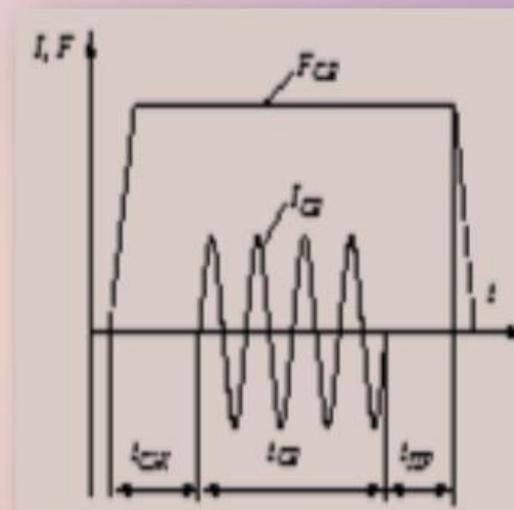
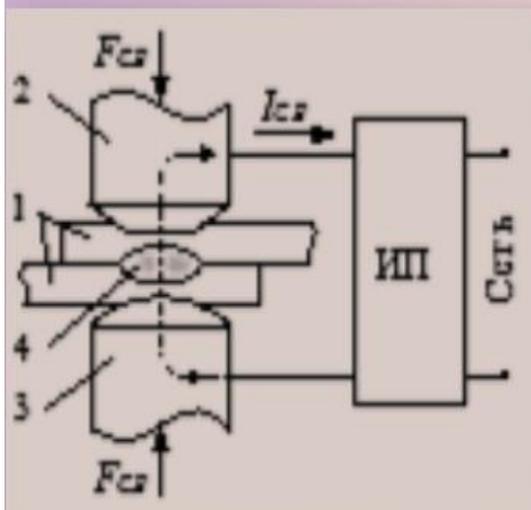
- высокий вакуум ( $10^{-1}$  Па)
- электроны, ускоренные электрическим полем
- при соударении электроны тормозятся
- энергия кинетическая - в тепловую
- в месте соударения темп.  $6000^\circ\text{C}$
- узкий и глубокий шов
- глубина кинжального проплавления 200-400 мм



Температура дуги увеличивается до  $20\,000^\circ\text{C}$

# Сварка точечным источником (ИФПМ СО РАН)

Схема двухсторонней контактной точечной сварки



Цикл изменения параметров режима

1 — свариваемые детали; 2 и 3 — токопроводящие электроды;  $F_{св}$ ,  $I_{св}$  — сварочные усилие и ток;  $t_{сж}$  — время сжатия деталей;  $t_{св}$  — время сварки (длительность импульса тока  $I_{св}$ );  $t_{пр}$  — время проковки соединения.

**На основе анализа большого числа систем различных элементов можно сделать выводы об условиях образования систем того или иного типа.**

1. Оптимальными условиями образования непрерывных твердых растворов между двумя элементами являются: нахождение элементов в одной группе периодической системы, одинаковый тип решетки, лишь незначительное различие размеров атомных радиусов (не более 10%), близость величин ионизационных потенциалов и электроотрицательностей.

2. Если радиусы атомов различаются на 10-20%, что, естественно, приводит к большому различию в ионизационных потенциалах и электроотрицательностях, то происходит образование ограниченных твердых растворов или интерметаллидов.

3. При различии радиусов атомов более чем на 20% элементы, как правило, не взаимодействуют друг с другом и нередко не смешиваются в расплавленном состоянии.

Пользуясь сведениями о свойствах элементов, можно предугадать возможность того или иного взаимодействия между металлами.

# Сварка трением с перемешиванием



Сформированный сварочный шов

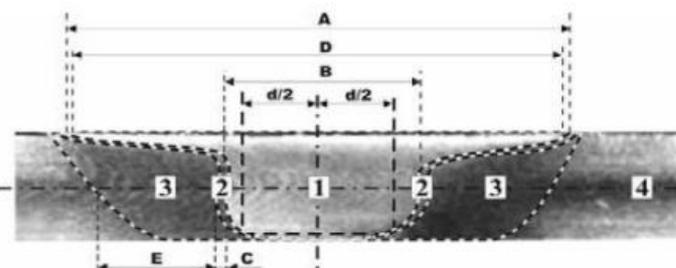
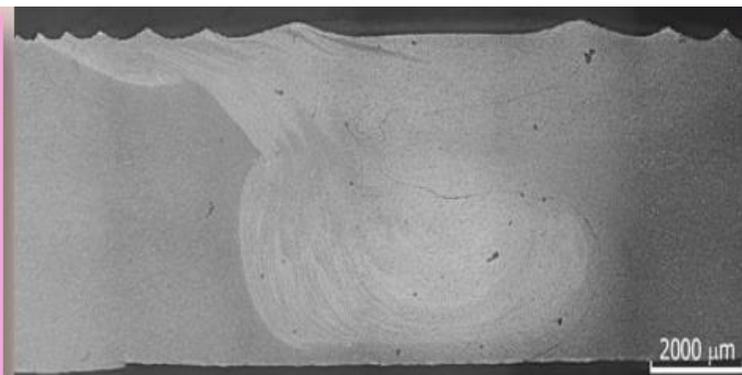


Рис. 4. Макроструктура сварного соединения, выполненного сваркой трением с перемешиванием, где 1 – сварной шов, 2 – зона термомеханического воздействия, 3 – зона термического влияния, 4 – основной металл  
A, B – геометрические границы сварного шва, D – диаметр опорной поверхности уступа, d – диаметр наконечника, E, C – ширина зон термического и термомеханического воздействия



Принципы разработки новых материалов и технологий

# Получение материалов и изделий





# Принципы создания новых сплавов

Создание структурно-стабильных материалов для наиболее напряженных конструктивных элементов сводится к разработке жаропрочных, выносливых, коррозионно-стойких сплавов различных химических элементов, обеспечивающих заданные работоспособность, надежность и безопасность создаваемых узлов и изделий техники.

Базовой основой при синтезе материалов являются металлические многокомпонентные системы с граничными растворами переменной концентрации компонентов и промежуточными фазами разной природы. Такие системы давно служили (и сейчас в большинстве случаев являются) базой для модификации существующих и разработки новых разнообразных конструкционных материалов – от обычных деформируемых или фасонно-литейных сплавов, подвергаемых упрочняющей термической обработке, до направленно закристаллизованных эвтектик. Важным методом в разработке новых сплавов с улучшенными технологическими и эксплуатационными свойствами является изучение фазовых равновесий в много-компонентных металлических системах и построение их диаграмм состояния.

Конструкционные материалы современной техники представляют собой сложные, многокомпонентные сплавы различных элементов. Некоторые характеристики элементов, которые могут являться потенциальной основой для будущего конструкционного материала, приведены в табл.

### Свойства некоторых элементов

Свойство	Be	C (графит)	Mg	Al	Ti	V	Fe	Ni	Zr	Nb	Mo	Ta	W
Кристаллическое строение													
Тип решетки	ГПУ/ ОЦК	ГПУ	ГПУ	ГЦК	ГПУ/ ОЦК	ОЦК	ОЦК/ ГЦК	ГЦК	ГПУ/ ОЦК	ОЦК	ОЦК	ОЦК	ОЦК
Параметр решетки, нм:													
<i>a</i>	0,2286	0,2456	0,3203	0,40496	0,2951	0,30301	0,2866/ <i>a</i> =0,3467	0,35238	0,3223	0,33021	0,314737	0,33074	0,31652
<i>c</i>	0,3584/ <i>a</i> =0,2546	0,6696	0,5201		0,4679/ <i>a</i> =0,3306				0,5147/ <i>a</i> =0,3610				
Теплофизические свойства при 20,°C													
Плотность $\rho$ , 10 <sup>3</sup> кг/м <sup>3</sup>	1,85	2,2–3,0	1,74	2,7	4,5	6,11	7,86	8,9	6,51	8,57	10,2	16,6	19,25
Температура плавления $T_{пл}$ , °C	1284	Субли- мация при 5000 °C	650	660	1664±4	1897 (1700)	1536±1	1454±2	1855±5	2477 (2415)	2587 (2625)	2997 (2850)	3379±2

Свойство	Be	C (графит)	Mg	Al	Ti	V	Fe	Ni	Zr	Nb	Mo	Ta	W
Механические свойства (в отожженном состоянии) при 20 °С													
Предел прочности при растяжении $\sigma_B$ , МПа	280–700	3,4–17,2	60–196	70–130	300–700	380–520	320–780	280–560	220–575	300–600	490–980	210–470	600–1480
Предел текучести при растяжении $\sigma_{0,2}$ , МПа	230–680	–	24–88	30–120	180–330	290–450	90–250	80–240	80–130	250–420 (491)	430–650	185–400	530–800 (1460)
Относительное удлинение $\delta$ , %	0,2–20	–	8–16	35–50	20–50	25–30 (14)	20–40	30–40	15–40	10–50	5–45	5–45	0–20
Модуль нормальной упругости $E$ , ГПа	287–311	18–1131	39–44	63–72	96–104	147	211	196–220	68–102	100	329	177	407
Модуль сдвига $G$ , ГПа	132–147	–	17–34	27	38	54	81	74	36	59	20	69	149
Коэффициент Пуассона, $\nu$	0,032–0,05	0,23–0,27	0,28–0,35	0,31–0,34	0,36	0,35	0,28	0,32	0,32–0,35	0,39	0,31	0,35	0,30
Твердость по Бринеллю $HB$ , МПа	590–1570	–	245–294	245	1810	630	490–900	665–765	640–685	735	1370–1815	440–1230	2570

**Примечание:** разброс значений по данным разных источников.

Из таблицы видно, что многие свойства элементов изменяются по мере увеличения атомной массы слева направо не монотонно, а периодами в зависимости от электронного строения атомов. В пределах каждой из трех групп элементов IV-A, V-A, VI-A атомный объем уменьшается, а плотность, температура плавления и другие физические свойства возрастают слева направо.

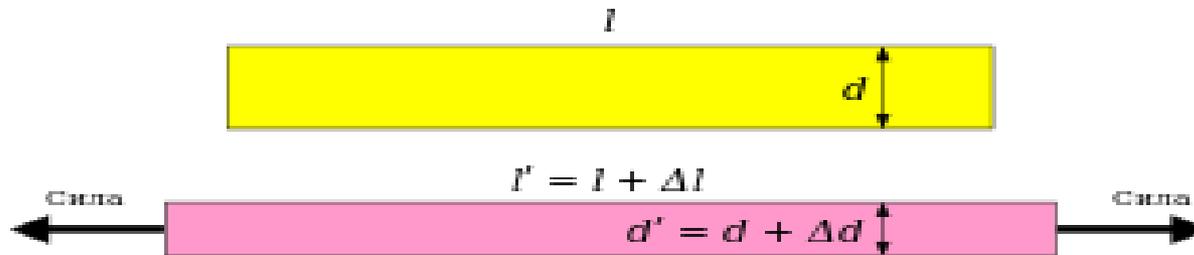
Такие характеристики, как пределы прочности и текучести, твердость, относительное удлинение, представлены как статистически средние значения, полученные при испытании образцов в различном структурном состоянии, поэтому их нельзя считать характеристиками природных свойств материала (металла). Тем не менее отметим относительно высокую прочность Ni, Fe, Mo и W, низкую пластичность Mo и W.

К легким металлам относят металлы с малой плотностью ( $\rho < 3 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>). Если не рассматривать щелочноземельные металлы, обладающие низким уровнем механических свойств (удельной прочности  $\sigma/\rho$  и жесткости  $E/\rho$ ), то группу легких металлов составляют элементы Al, Mg и Be. Титан имеет более высокую плотность ( $\rho = 4,5 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>), но его часто относят к группе легких металлов.

Прочность некоторых сплавов легких металлов и для сравнения относительно высокопрочной аустенитной стали приведена в таблице. Видно, что по характеристикам удельной прочности и жесткости легкие материалы неравноценны – лучшие характеристики имеет бериллий.

# Коэффициент Пуассона

Коэффициент Пуассона — упругая константа, величина отношения относительного поперечного сжатия к относительному продольному растяжению. Этот коэффициент зависит не от размеров тела, а от природы материала, из которого изготовлен образец.



$$\mu = - \frac{\frac{\Delta d}{d}}{\frac{\Delta l}{l}}$$

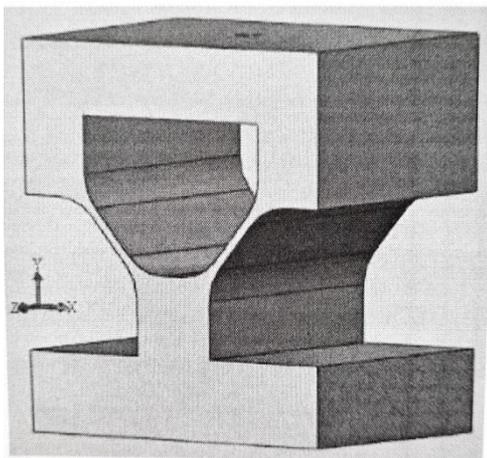
# Ауксетики

Существуют также материалы (преимущественно полимеры), у которых коэффициент Пуассона отрицателен, такие материалы называют ауксетиками. Это значит, что при приложении растягивающего усилия поперечное сечение тела увеличивается.

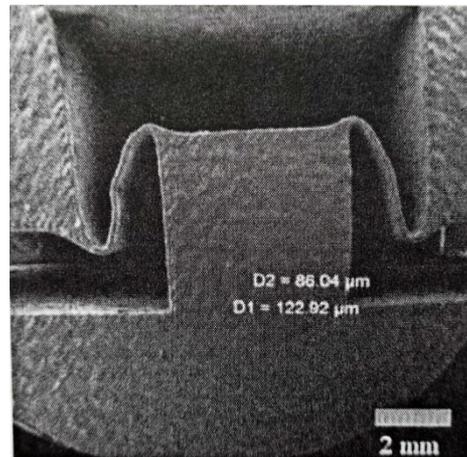
К примеру, бумага из однослойных нанотрубок имеет положительный коэффициент Пуассона, а по мере увеличения доли многослойных нанотрубок наблюдается резкий переход к отрицательному значению  $-0,20$ .

Отрицательным коэффициентом Пуассона обладают многие анизотропные кристаллы, так как коэффициент Пуассона для таких материалов зависит от угла ориентации кристаллической структуры относительно оси растяжения. Отрицательный коэффициент обнаруживается у таких материалов, как литий (минимальное значение равно  $-0,54$ ), натрий ( $-0,44$ ), калий ( $-0,42$ ), кальций ( $-0,27$ ), медь ( $-0,13$ ) и других. 67 % кубических кристаллов из таблицы Менделеева имеют отрицательный коэффициент Пуассона.

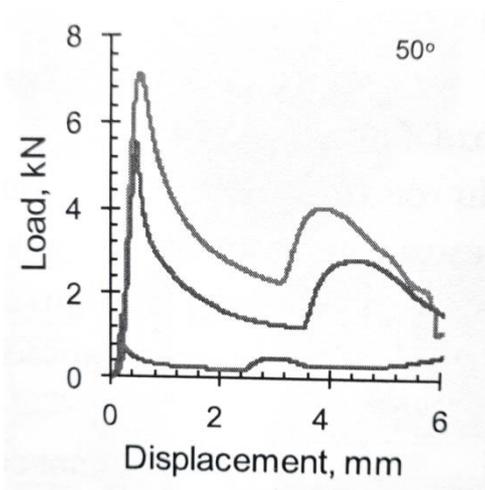
Демонстрация свойств аустенитического материала при изменении направления нагружения в момент потери механической стабильности, когда пластическое сжатие становится растяжением.



Model of the clip



Clip after testing

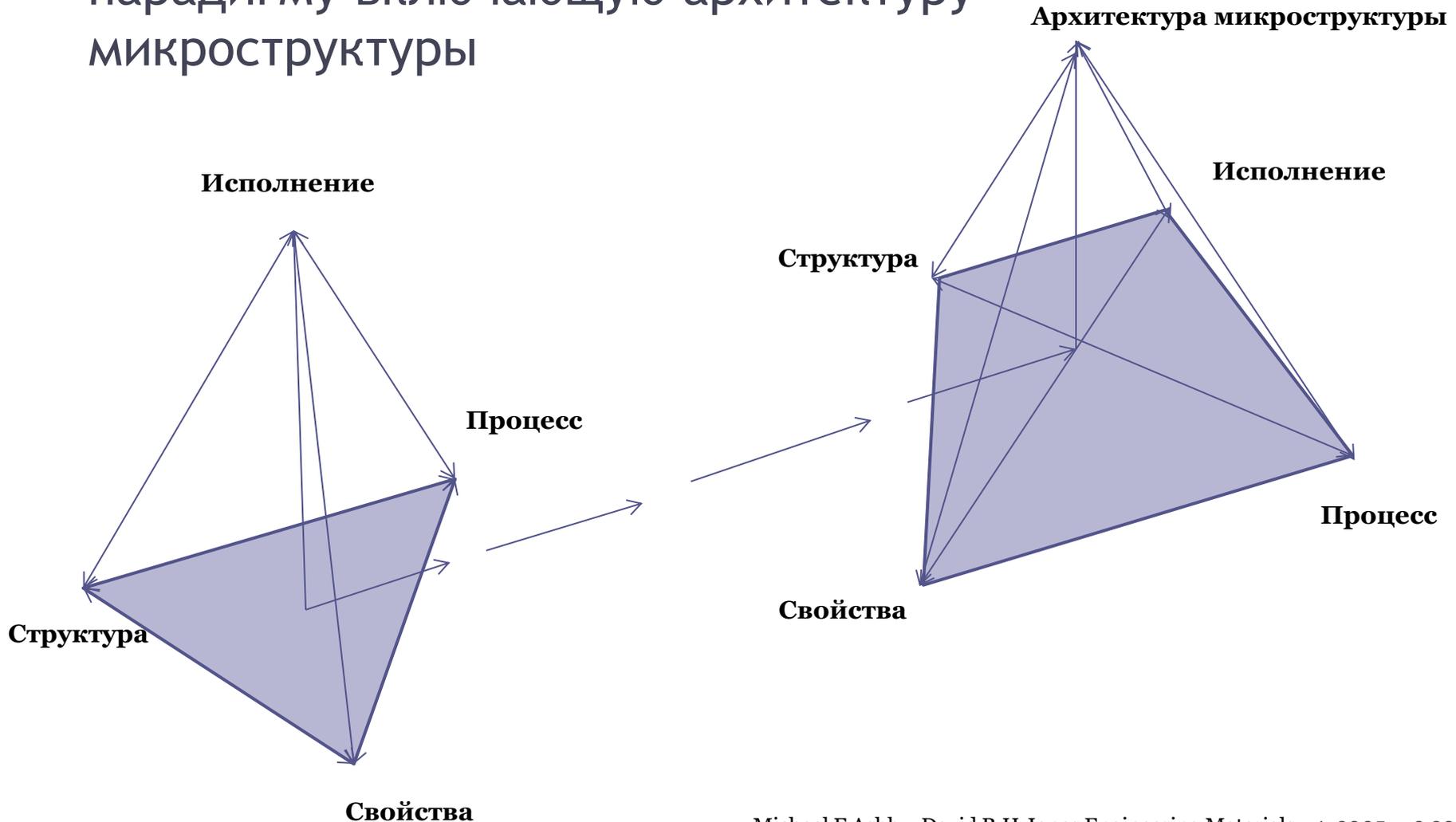


Loading diagrams of samples with different wall thicknesses located at angles 50°

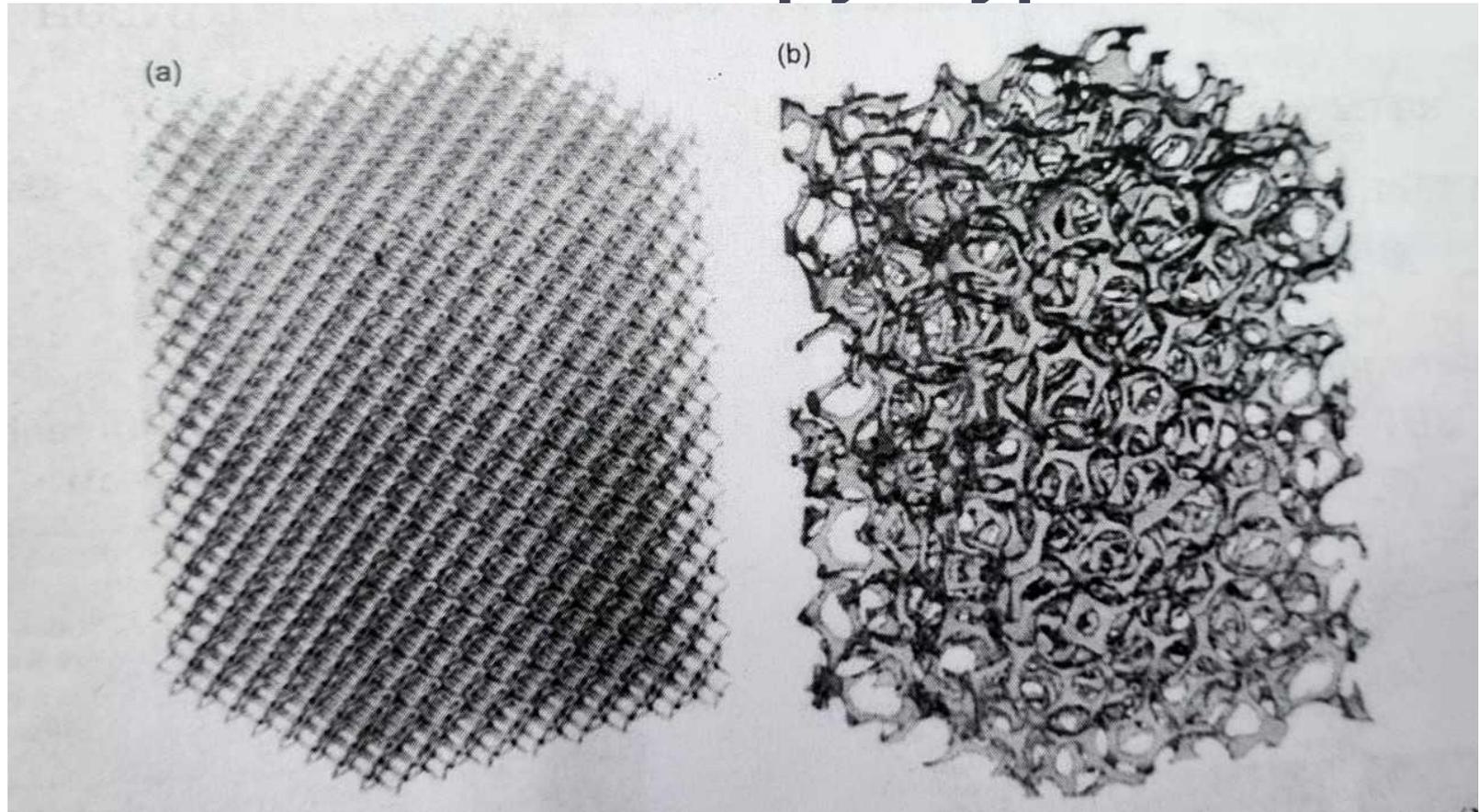
# Метаматериалы

- **Гибридные наноструктурные материалы - новое направление в материаловедении**
- **Композиты особого типа, обладающие свойствами, не достижимыми при использовании их отдельных составляющих**
- **Архитектуру гибрида, определяемую формой и расположением «элементарных кирпичиков», из которых он составлен, можно рассматривать как дополнительную степень свободы, использование которой в разработке новых материалов может привести к радикально новым свойствам**

# Преобразование парадигмы традиционного (обычного) материаловедения и технологий в парадигму включающую архитектуру микроструктуры



# CAD-модели формирования открытых сотовых структур



**а) Компьютерное представление на основе элементов mesh модели**

**б) Стохастическая модель пены на основе микро-СТсканированных элементов**

# Метаматериалы в медицине

Так, сотрудники научно-исследовательского центра «Физическое материаловедение и композитные материалы» ТПУ для замещения костных дефектов разрабатывают биоинспирированные (созданные с учетом принципов, действующих в живой природе) материалы для 3D-печати.

По словам Романа Сурменева, костная ткань человека представляет собой сложный композиционный материал с организованной на нескольких уровнях структурой, обладающий уникальными механическими характеристиками. В свою очередь, ученые работают с механическими метаматериалами, манипулируют их свойствами, например плотностью, чтобы добиться сходства с человеческой костью.

«Мы используем чистый титан, или сплав Ti-6Al-4V, который разрешен для использования в медицинских целях, при этом изменяем его архитектуру (построение. — Прим. ред.), которая имитирует структуру кости», — сообщил он.

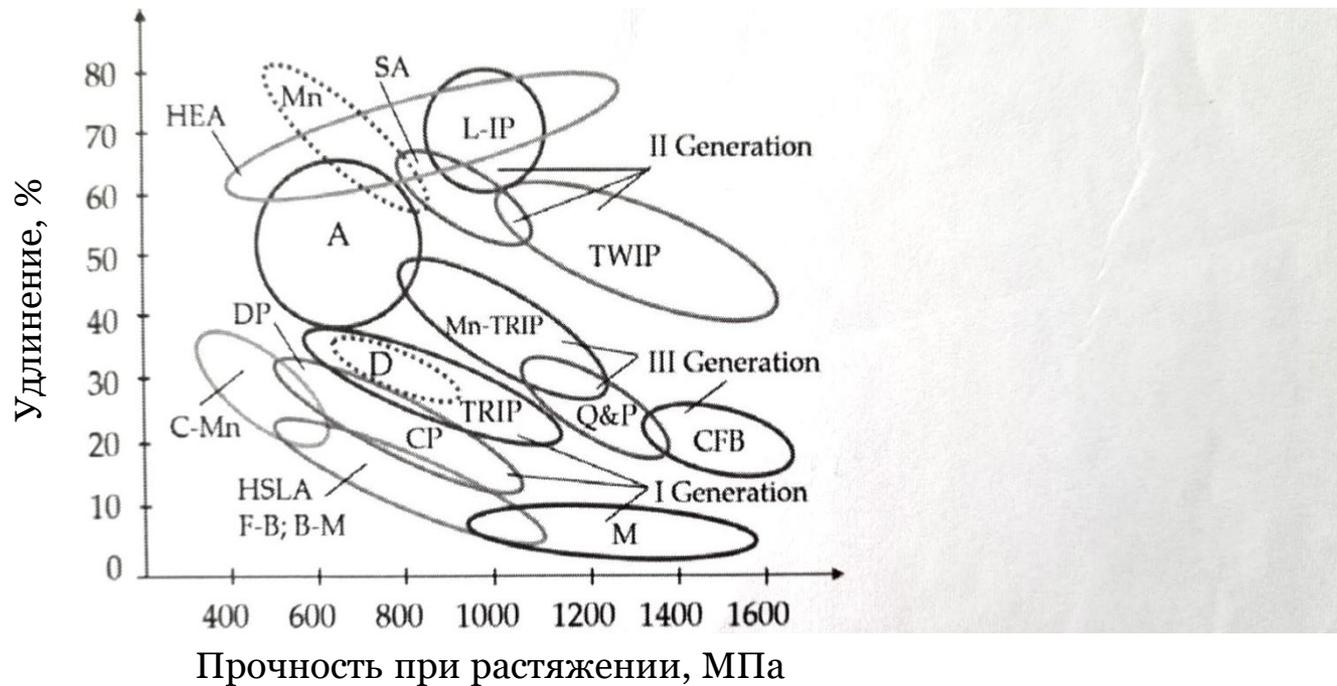
# От суперсплавов к высокоэнтропийным

- **Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС)** — сплавы, которые содержат не менее 5 элементов, причём количество каждого из них не должно превышать 35 ат % и не должно быть меньше 5 ат. %. Для таких сплавов характерны повышенные, по сравнению с традиционными многокомпонентными сплавами, значения энтропии смешения  $S_{mix}$ , являющиеся основным фактором, обеспечивающим формирование однофазного твердого раствора, причем такой твердый раствор будет обладать высокими эксплуатационными характеристиками. Начиная с **2000-х годов** уникальные физико-механические свойства ВЭС являются предметом повышенного внимания исследователей
- **Высокоэнтропийные сплавы** выделены в особую группу, так как процессы структуро- и фазообразования в них, а также диффузионная подвижность атомов, механизм формирования механических свойств и термическая стабильность существенно отличаются от аналогичных процессов в традиционных сплавах. К последним относятся сплавы, в которых есть базовые элементы (Fe, Ni, Mo, Al и др.), определяющие кристаллическую решетку материала. Фазовый состав таких сплавов легко прогнозировать исходя из двойных или тройных диаграмм состояния, а введение легирующих добавок приводит либо к твердорастворному упрочнению исходной решетки, либо к выделению в ней дисперсных фаз.

# От суперсплавов к высокоэнтروпийным

- В настоящее время изучено множество различных ВЭСов, и, несмотря на то, что исследования носят пока чисто научный характер и направлены на установление закономерностей влияния различных факторов (размер атомов, электроотрицательность, энтальпия смешения, электронная концентрация и т.д.) на свойства получаемых ВЭСов, среди исследованных сплавов есть материалы, которые по твердости, жаропрочности, жаростойкости, коррозионной стойкости, износостойкости и термостабильности уже могут конкурировать с лучшими традиционными сплавами специального назначения.

# Механические свойства традиционных и перспективных высокопрочных сталей



C-Mn – перлитные стали; HSLA – высокопрочные малолегированные стали; F-B – феррито-бейнитные стали; DP – двухфазные стали; CP – сложнофазные стали; D – дуплекс стали; TRIP – метастабильные стали с наведенной пластичностью; M – мартенситные стали; TWIP – аустенитные высокомарганцевые стали с наведенной пластичностью; Mn-TRIP – среднемарганцевые TRIP-стали; Q&P – мартенситно-аустенитные стали; SBF – бейнитные стали со свободным графитом; A – аустенитные стали; SA – супераустенитные стали; L-IP – легкие стали с наведенной пластичностью; Mn – высокомарганцевые стали; HEA – высокоэнтропийные сплавы

# Принципы и механизмы повышения стойкости металлических материалов, подвергаемых внешним высокоэнергетическим воздействиям

- Как правило строятся на основе использования роли атомного уровня в рассеивании подведенной энергии, процессов массопереноса и переноса энергии и эволюции дефектной структуры, а также противодействия возможным разрушениям путем оптимизации наноструктуры материала (тип кристаллической решетки, дефектная структура, легирование) частицами и фазами наноструктурных размеров.
- И включает в себя следующие направления работ:
  - Фундаментальные исследования построения моделей процессов и явлений, происходящих при высокоэнергетическом воздействии на атомном уровне
  - Экспериментальные исследования структурно-фазового состояния до и после воздействия
  - Комплексный анализ теоретических и экспериментальных данных и выход на прогнозирование устойчивости к воздействию путем оптимизации структуры и долговременной службы

# Слоистые материалы с МАХ- фазой

МАХ-фазы представляют собой новый класс термодинамически стабильных слоистых материалов, которые сочетают в себе преимущества керамики и металлов.

Максимальные фазы представляют собой слоистые гексагональные карбиды и нитриды, которые имеют общую формулу:  $M_n + 1ax_n$ , (МАХ), где  $n = 1-4$ , а М - ранний переходный металл, А - группа А (в основном IIIA и IVA или группы 13 и 14), а Х - либо углерод и/или азот. Слоистая структура состоит из разделяющих ребра искаженных октаэдров  $XM_6$ , чередующихся одиночными плоскими слоями элемента А-группы.

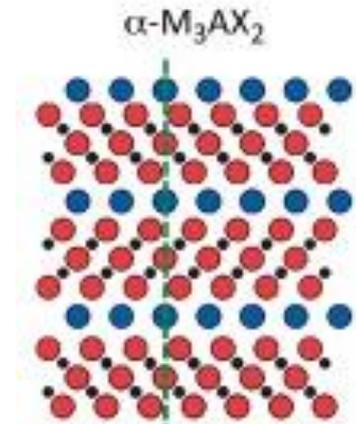
Они устойчивы к механическому воздействию и высоким температурам, имеют хорошую электро- и теплопроводность, а также коррозионную стойкость. В своем исследовании ученые использовали МАХ-фазу с разным соотношением кремния и алюминия в составе. Они комбинировали прекерамические листы, укладывая их послойно, для получения различной архитектуры ламинированных композитов. После чего «запекли» эти слои методом искрового плазменного спекания..

# Материалы на основе MAX-фаз

$M_{n+1}AX_n$  - семейство тройных слоистых соединений, где M – переходный металл, A – элемент IIIA-IVA группы, X – углерод или азот.

IA	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VII	VIIIA
		H															He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Unq	Unp	Unh	Uns	Uno	Une									

■ M early transition metal  
■ A group A element  
■ X C and/or N



Комбинированные свойства металлов и керамики:

- высокая температура плавления (около 3000 °С);
- жаропрочность (проявление пластических свойств при температурах выше 900 °С);
- стойкость к термическим ударам;
- стойкость к окислению и коррозии;
- теплопроводность;
- механическая обрабатываемость.

# Основные принципы создания поверхностных слоев и покрытий многокомпонентного состава устойчивых к трению

- 1. Прогнозирование свойств многокомпонентных материалов на основе теории дислокаций и конфигурационной модели веществ (КМВ).
- Согласно КМВ, все свойства твердого тела ( твердость, температура плавления, адгезионная активность, диффузионная активность и т.д.) зависят от статического веса атомов со стабильной конфигурацией (СВАСК)  $sp_i$  и  $d$  – конфигурацией вещества и поэтому между отдельными свойствами твердого тела имеется корреляция. Такая корреляция должна быть между диффузионной активностью покрытия и адгезионной его активностью по отношению к покрытому телу. Поэтому целесообразно оценивать качество покрытия по его адгезионной активности. Установлено, что склонность адгезии способствует увеличению температуры (до определенного предела), увеличение частоты колебаний атомов, которая коррелируется СВАСК, рост подвижности дислокаций, которая обратно пропорциональна твердости.
- Общий анализ тугоплавких металлов, наименее склонных к термическому активированию, показал, что с точки зрения термодинамики более выгодно использовать карбиды и нитриды IV и V групп.

# Продолжение

- Использование метода термодинамического потенциала (энергии Гиббса). Рассмотрим подробнее значение энергии Гиббса, или термодинамического потенциала, а также – энтропии и энтальпии смеси на формирования слоев покрытий двух- или многокомпонентного состава. Как известно, под энергией Гиббса понимается величина, показывающая изменение энергии в ходе химической реакции и дающая таким образом ответ на вопрос о принципиальной возможности протекания химической реакции в системе. Если энтропия смешения играет доминирующую роль в определении фазовой стабильности, можно прийти к следующим выводам:
  - большее  $N$  приведет к большей вероятности образования высокоэнтропийных соединений,
  - различные сплавы, содержащие равное количество компонентов, будут иметь равную вероятность образования высокоэнтропийных соединений и равный атомный состав всегда более благоприятен для формирования высокоэнтропийных соединений, чем неравномерный атомный состав.
- Очевидно, что энтропия смешения, по крайней мере, не во всех случаях играет доминирующую роль в определении стабильности фазы и, следовательно, микроструктуры сплава. Как известно, система достигает своего равновесного состояния, когда полная энергия системы достигает глобального минимума. Стабильность каждой фазы описывается ее энергией Гиббса, которая, в свою очередь, учитывает составляющие как энтальпии, так и энтропии. Энергия Гиббса является функцией температуры для соединений с линейной структурой, функцией температуры и состава для фазы неупорядоченного твердого раствора и функцией температуры, состава и фракции участка для упорядоченной интерметаллидной фазы с областью гомогенности. Наиболее очевидным способом представления фазовой стабильности в системе является ее фазовая диаграмма. Если имеется фазовая диаграмма, можно выбрать состав сплава, желаемую микроструктуру – однофазную, либо многофазную.

## Продолжение

- Учёт при выборе элементного состава покрытия, особенно многокомпонентного покрытия, правила Юм-Розери:
  1. Если атомный размер атома В отличается более чем на 15% от атомного размера атома А, то структура неустойчива даже при низкой концентрации В.
  2. Если В имеет значительно большую электроотрицательность, чем А, т. е. если в соединении АВ В привлекает электроны сильнее, чем А, то образуются характерные химические соединения  $AxBy$ , в которых связи имеют ионный характер. При том, что не всегда просто количественно определить электроотрицательность атома, в основном, чем больше различие в электроотрицательности между двумя элементами, тем сильнее тенденция к образованию соединений между ними.
  3. Определенные структуры соединений возникают преимущественно в характерных пределах концентрации валентных электронов. Эта величина указывает количество всех валентных электронов в сплаве, деленное на число атомов
- Имеющиеся исследования показывают, что, учитывая разное число неэквивалентных точек решетки в элементарной ячейке, раствор с объемноцентрированной кубической структурой представляет собой более высокую конфигурационную энтропию до пяти элементов, при этом в структуре, содержащей от 5 до 10 элементов гранецентрированная кубическая решетка имеет большую энтропию конфигурации, в то время как гексагональная плотноупакованная решетка имеет большее значение, чем ОЦК и ГЦК-формы для числа больше 10. Большое количество возможных композиций высокоэнтропийных соединений метаматериала требует разработки методики прогнозирования образования твердых растворов в таких многокомпонентных эквимольных системах, как метаматериалы.

**СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!**