

Frontier Materials & Technologies

Основан в 2008 г.

№ 3-1
2022

16+

Ежеквартальный
научный журнал

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Главный редактор

Криштал Михаил Михайлович, д. ф.-м. н., профессор

*Заместитель главного редактора по направлению
«Металлургия и материаловедение»*

Мерсон Дмитрий Львович, д. ф.-м. н., профессор

*Заместитель главного редактора по направлению
«Машиностроение и машиноведение»*

Шайкин Александр Петрович, д. т. н., профессор

*Заместитель главного редактора по направлению
«Сварка, родственные процессы и технологии»*

Ковтунов Александр Иванович, д. т. н., доцент

Редакционная коллегия:

Бочкарев Петр Юрьевич, д. т. н., профессор

Бржозовский Борис Максович, д. т. н., профессор

Виноградов Алексей Юрьевич, д. т. н., к. ф.-м. н., профессор

Гаврюшин Сергей Сергеевич, д. т. н., профессор

Герштейн Грегори, д. т. н.

Глезер Александр Маркович, д. ф.-м. н., профессор

Гречников Федор Васильевич, академик РАН, д. т. н., профессор

Денисенко Александр Федорович, д. т. н., профессор

Казаков Александр Анатольевич, д. т. н., профессор

Карпов Михаил Иванович, член-корреспондент РАН, д. т. н., профессор

Кацман Александр Владимирович, к. ф.-м. н.

Кудря Александр Викторович, д. т. н., профессор

Кузьмин Сергей Викторович, член-корреспондент РАН, д. т. н., профессор

Ларшин Василий Петрович, д. т. н., профессор

Макаров Алексей Викторович, член-корреспондент РАН, д. т. н.

Максимова Светлана Васильевна, д. т. н.

Мулюков Радик Рафикович, член-корреспондент РАН, д. ф.-м. н., профессор

Наймарк Олег Борисович, д. ф.-м. н., профессор

Носов Николай Васильевич, д. т. н., профессор

Пилинский Александр Вениаминович, к. т. н., доцент

Романов Алексей Евгеньевич, д. ф.-м. н., профессор

Рубаник Василий Васильевич, д. т. н.

Старобинский Рудольф Натанович, д. т. н., профессор

Сундер Рамасуббу, член Индийской академии наук, к. т. н.

Табаков Владимир Петрович, д. т. н., профессор

Худобин Леонид Викторович, д. т. н., профессор

Шишков Владимир Александрович, д. т. н.

Эстрин Юрий Захарович, д. ф.-м. н., профессор

До декабря 2021 года журнал выходил под названием «Вектор науки Тольяттинского государственного университета».

Индексируется в Scopus. Включен в Перечень ВАК, ядро РИНЦ. Доступен в Crossref, Google Scholar.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-83040 от 31 марта 2022 г.).

Компьютерная верстка:
Н.А. Никитенко

Ответственный/технический редактор:
Н.А. Никитенко

Адрес редакции: 445020, Россия, Самарская область, г. Тольятти, ул. Белорусская, 14
Тел.: (8482) 44-91-74
E-mail: vektornaukitgu@yandex.ru

Сайт:
<https://vektornaukitech.ru>

Подписано в печать
30.09.2022.

Выход в свет 01.12.2022.

Формат 60×84 1/8.

Печать цифровая.

Усл. п. л. 14,2.

Тираж 28 экз. Заказ 3-348-22.

Цена свободная.

СВЕДЕНИЯ О ЧЛЕНАХ РЕДКОЛЛЕГИИ

Главный редактор

Кристал Михаил Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, ректор (Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия).

Заместитель главного редактора по направлению «Металлургия и материаловедение»

Мерсон Дмитрий Львович, доктор физико-математических наук, профессор, директор Научно-исследовательского института перспективных технологий (Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия).

Заместитель главного редактора по направлению «Машиностроение и машиноведение»

Шайкин Александр Петрович, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Энергетические машины и системы управления» (Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия).

Заместитель главного редактора по направлению «Сварка, родственные процессы и технологии»

Ковтунов Александр Иванович, доктор технических наук, доцент, профессор кафедры «Сварка, обработка материалов давлением и родственные процессы» (Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия).

Редакционная коллегия:

Бочкарев Петр Юрьевич, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Технология машиностроения и прикладная механика» (Камышинский технологический институт (филиал) Волгоградского государственного технического университета, Камышин, Россия), профессор кафедры «Техническое обеспечение АПК» (Саратовский государственный аграрный университет имени Н.И. Вавилова, Саратов, Россия).

Бржозовский Борис Максевич, доктор технических наук, профессор главный научный сотрудник лаборатории теории механизмов и структуры машин (Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, Москва, Россия).

Виноградов Алексей Юрьевич, доктор технических наук, кандидат физико-математических наук, профессор факультета механической и промышленной инженерии (Норвежский университет науки и технологии, Тронхейм, Норвегия).

Гаврюшин Сергей Сергеевич, доктор технических наук, профессор, заведующий лабораторией компьютерных систем автоматизации производства и цифровых технологий (Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет), Москва, Россия).

Герштейн Грегори, доктор технических наук, заведующий лабораторией (Ганноверский университет имени Готфрида Вильгельма Лейбница, Ганновер, Германия).

Глезер Александр Маркович, доктор физико-математических наук, профессор, директор Научного центра металловедения и физики материалов (Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И.П. Бардина, Москва, Россия).

Гречников Федор Васильевич, академик РАН, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой обработки металлов давлением (Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия).

Денисенко Александр Федорович, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Технология машиностроения, станки и инструменты» (Самарский государственный технический университет, Самара, Россия).

Казаков Александр Анатольевич, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Металлургические и литейные технологии», руководитель научно-испытательной лаборатории «Металлургическая экспертиза» (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия).

Карпов Михаил Иванович, член-корреспондент РАН, доктор технических наук, профессор, заведующий лабораторией материаловедения (Институт физики твердого тела Российской академии наук, Черноголовка, Россия).

Кацман Александр Владимирович, кандидат физико-математических наук, PhD, старший научный сотрудник (Технион – Израильский технологический институт, Хайфа, Израиль).

Кудря Александр Викторович, доктор технических наук, профессор, заместитель заведующего кафедрой металловедения и физики прочности (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия).

Күзьмин Сергей Викторович, член-корреспондент РАН, доктор технических наук, профессор, первый проректор, профессор кафедры «Оборудование и технология сварочного производства» (Волгоградский государственный технический университет, Волгоград, Россия).

Ларшин Василий Петрович, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры технологии машиностроения (Одесский национальный политехнический университет, Одесса, Украина).

Макаров Алексей Викторович, член-корреспондент РАН, доктор технических наук, главный научный сотрудник, заведующий отделом материаловедения и лабораторией механических свойств (Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия).

Макимова Светлана Васильевна, доктор технических наук, старший научный сотрудник, заведующий отделом «Физико-химические процессы пайки» (Институт электросварки им. Е.О. Патона Национальной академии наук Украины, Киев, Украина).

Мулюков Радик Рафикович, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, директор (Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, Уфа, Россия).

Наймарк Олег Борисович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией «Физические основы прочности» (Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук, Пермь, Россия).

Носов Николай Васильевич, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Технология машиностроения, станки и инструменты» (Самарский государственный технический университет, Самара, Россия).

Пилинский Александр Вениаминович, кандидат технических наук, доцент, MSME (Master of Science in Mechanical Engineering), менеджер («Реймер Металс Корпорейшн», Лос-Анджелес, США).

Романов Алексей Евгеньевич, доктор физико-математических наук, профессор Института перспективных систем передачи данных, руководитель научно-исследовательского центра перспективных функциональных материалов и лазерных коммуникационных систем (Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия)

Рубаник Василий Васильевич, член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, доктор технических наук, заведующий лабораторией физики металлов (Институт технической акустики Национальной академии наук Беларуси, Витебск, Республика Беларусь).

Старобинский Рудольф Натанович, доктор технических наук, профессор, научный консультант (консалтинг-бюро “Prof. Starobinski. Silencers. Consulting and Engineering”, Гамбург, Германия).

Сундер Рамасуббу, член Индийской академии наук, кандидат технических наук, директор (“BISS (P) Ltd”, Бангалор, Индия).

Табakov Владимир Петрович, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Инновационные технологии в машиностроении» (Ульяновский государственный технический университет, Ульяновск, Россия).

Худобин Леонид Викторович, доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Инновационные технологии в машиностроении» (Ульяновский государственный технический университет, Ульяновск, Россия).

Шишков Владимир Александрович, доктор технических наук, начальник технического отдела (ООО «Палладио», Тольятти, Россия).

Эстрин Юрий Захарович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры инженерных материалов (Университет им. Монаша, Мельбурн, Австралия).

СОДЕРЖАНИЕ

Моделирование механических и физических свойств пучка углеродных нанотрубок при поперечном сжатии с использованием цепной модели с редуцированным числом степеней свободы Абдуллина Д.У., Галиахметова Л.Х., Бебихов Ю.В.	15
Вклад механизмов упрочнения при немономтонном изменении свойств в сплаве Cu–0,6Cr–0,1Zr при кручении под высоким давлением Аксенов Д.А., Фаизова С.Н., Фаизов И.А.	23
Распределение микротвердости по поверхности металлического стекла на основе циркония, подвергнутого интенсивной пластической деформации кручением Астанин В.В., Гундеров Д.В., Титов В.В.	33
Шероховатость и микротвердость ультрамелкозернистого титана Grade 4, подвергнутого безабразивной ультразвуковой финишной обработке Асфандияров Р.Н., Рааб Г.И., Гундеров Д.В., Аксенов Д.А., Рааб А.Г., Гундерова С.Д., Шишкунова М.А.	41
Исследование влияния параметров режима сварки трением с перемешиванием меди на механические свойства и электропроводность сварных соединений Атрощенко В.В., Селиванов А.С., Лобачев В.С., Логачев Ю.В., Садрисламов А.Р.	50
Моделирование дислокационного электропластического эффекта в монокристалле методом молекулярной динамики Брызгалов В.А., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Бебихов Ю.В.	61
Влияние старения на микротвердость и электропроводность сплава Cu–2 вес. % Be Зайнуллина Л.И., Саркеева Е.А., Александров И.В., Валиев Р.З.	69
Моделирование преодоления препятствий в виде пор дислокациями в вольфраме Казаков А.М., Шарапова Ю.Р., Бабичева Р.И., Зиновьев А.В., Терентьев Д.А., Семенов А.С.	76
Конечно-элементное моделирование усталостного поведения медицинского имплантата, изготовленного из титана в крупнозернистом и наноструктурном состояниях Капустин А.В., Еникеев Н.А.	85
Механические свойства, электропроводность и термостабильность проволоки из сплавов системы Al–Fe, полученных литьем в электромагнитный кристаллизатор Медведев А.Е., Жукова О.О., Федотова Д.Д., Мурашкин М.Ю.	96
О совместимости хирургических имплантатов из биорезорбируемых магниевых сплавов с медицинскими изделиями из титановых сплавов Мягких П.Н., Мерсон Е.Д., Полуянов В.А., Мерсон Д.Л., Бегун М.Э.	106
НАШИ АВТОРЫ	115

CONTENT

Simulation of mechanical and physical properties of a carbon nanotubes bundle under the transverse compression using a chain model with the reduced number of degrees of freedom Abdullina D.U., Galiakhmetova L.Kh., Bebikhov Yu.V.	15
Hardening mechanisms contribution at nonmonotonic change of properties in the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy at high pressure torsion Aksenov D.A., Faizova S.N., Faizov I.A.	23
Microhardness distribution over the surface of Zr-based metallic glass exposed to high-pressure torsion Astaniin V.V., Gunderov D.V., Titov V.V.	33
Roughness and microhardness of UFG Grade 4 titanium under abrasive-free ultrasonic finishing Asfandiyarov R.N., Raab G.I., Gunderov D.V., Aksenov D.A., Raab A.G., Gunderova S.D., Shishkunova M.A.	41
The study of the effect of parameters of the mode of copper friction stir welding on the mechanical properties and electrical conductivity of welded joints Atroshchenko V.V., Selivanov A.S., Lobachev V.S., Logachev Yu.V., Sadrislamov A.R.	50
Modeling of the dislocation electroplastic effect in a single crystal using the molecular dynamics method Bryzgalov V.A., Dmitriev S.V., Korzniikova E.A., Bebikhov Yu.V.	61
The influence of aging on microhardness and electrical conductivity of Cu–2 wt. % Be alloy Zaynullina L.I., Sarkeeva E.A., Alexandrov I.V., Valiev R.Z.	69
Simulation of overcoming obstacles in the form of pores by dislocations in tungsten Kazakov A.M., Sharapova Yu.R., Babicheva R.I., Zinovev A.V., Terentyev D.A., Semenov A.S.	76
Finite-element simulation of fatigue behavior of a medical implant produced from titanium in the large-grained and nanostructured states Kapustin A.V., Enikeev N.A.	85
The mechanical properties, electrical conductivity, and thermal stability of a wire made of Al–Fe alloys produced by casting into an electromagnetic crystallizer Medvedev A.E., Zhukova O.O., Fedotova D.D., Murashkin M.Yu.	96
On the compatibility of surgical implants of bioresorbable magnesium alloys with medical devices of titanium alloys Myagkikh P.N., Merson E.D., Poluyanov V.A., Merson D.L., Begun M.E.	106
OUR AUTHORS	115

В 2022 году свой 90-летний юбилей отмечают наши коллеги – Уфимский государственный авиационный технический университет. На протяжении всех этих лет в УГАТУ развивались научные школы машиностроения, технологий обработки и металловедения.

В выпуске № 3 2022 года журнала *Frontier Materials & Technologies* представлено 20 работ ученых, ассоциированных со школами металловедения УГАТУ.



Институт авиационных технологий и материалов – кузница технологий и подготовки инженерных кадров

История ИАТМ

Сегодня Уфа во всем мире признана одним из ведущих центров авиадвигателестроения. Здесь расположены крупнейшие авиационные предприятия, такие как ПАО ОДК «Уфимское моторостроительное производственное объединение», «Гидравлика», Уфимское агрегатное производственное объединение (УАПО), Уфимское приборостроительное производственное объединение (УППО), а также крупнейший в регионе поставщик высококвалифицированных кадров – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение «Уфимский государственный авиационный технический университет» (УГАТУ). В университете обучаются студенты из Республики Башкортостан, РФ и ряда стран ближнего и дальнего зарубежья.

Одним из «железных» подразделений университета, где ведется подготовка инженерных кадров высокой квалификации и проводятся обширные научные исследования, является Институт авиационных технологий и материалов (ИАТМ).

Немного остановимся на истории возникновения и этапах развития этого легендарного подразделения университета.

В начальный период работы авиационного института в г. Рыбинске (1932–1941) руководство учебной работой было возложено на два подразделения: отделение холодной обработки металлов и отделение авиационных двигателей. Лишь после эвакуации авиационного института из г. Рыбинска в г. Уфу в 1942 году был создан первый моторостроительный факультет, деканом которого, объединившим руководство всеми специальностями, был назначен С.И. Куликов. Преподавателями стали крупные ученые, эвакуированные в Уфу: Н.Н. Боголюбов, Г.Н. Савин, Г.Ф. Проскура, Г.Д. Ла-

тышев, И.Я. Штаерман и другие. Они возглавили кафедры высшей математики, сопротивления материалов, гидравлики и гидравлических машин, физики и теоретической механики. Специальные и общетехнические дисциплины вели инженеры авиадвигательного завода. В июне 1943 года из моторостроительного факультета был выделен факультет станков и холодной обработки металлов (деканом временно был назначен заведующий лабораторией двигателей, инженер С.В. Сокуров, которого с 1 сентября 1943 года сменил И.А. Базилевич). В 1946 году факультет станков и холодной обработки металлов был переименован в механико-технологический факультет, который под этим названием функционировал более 30 лет.

До 1962 года на факультете была только одна специальность – «Технология холодной обработки металлов», позже появились специальности «Технология машиностроения», «Металлорежущие станки и инструменты». В 1962 году открылись две новые специальности: «Машины и обработка металлов давлением» и «Оборудование и технология сварочного производства» на кафедре общей технологии и металловедения. В 1965 году открылась специальность «Автоматизация и комплексная механизация машиностроения». В 1966 году на механико-технологическом факультете начались занятия с будущими инженерами-экономистами по специальности «Экономика и организация машиностроительной промышленности». В 1968 году из кафедры «Общая технология и металловедение» (ОТиМ) выделены кафедры «Машины и обработка металлов давлением» и «Оборудование и технология сварочного производства». В 1971 году из механико-технологического выделился инженерно-экономический факультет.

С 1972 года подготовка инженеров-электромехаников по специальности «Автоматизация и комплексная механизация машиностроения» была передана на электромеханический факультет (позднее до 1991 года студенты этой специальности выпускались факультетом систем управления и факультетом информатики и робототехники).



Первое здание Уфимского авиационного института, 1943 год

Учитывая характер и область будущей работы выпускников, содержание подготовки студентов всех специальностей механико-технологического факультета приобретало все более авиационную направленность.

В связи с этим в 1974 году он был переименован в авиационно-технологический факультет. В 1976 году открыта специальность «Машины и технология литейного производства». В связи с расширением объема подготовки инженеров по специальностям «горячей» обработки металлов (сварка, литье, обработка давлением) в 1977 году авиационно-технологический факультет был разделен на первый и второй авиационно-технологические факультеты.

Первый авиационно-технологический факультет готовил инженеров по специальности «Технология машиностроения, металлорежущие станки и инструменты» со специализациями «Технология машиностроения», «Металлорежущие станки» и «Резание металлов и режущий инструмент». На этом факультете было пять кафедр: «Технология машиностроения», «Металлорежущие станки и средства автоматизации», «Резание металлов и режущий инструмент», «Общая химия», «Детали машин и теория механизмов». В 1988 году на факультете началась подготовка специалистов по специальности «Автоматизация технологических процессов и производств», выпуск которой был поручен созданной тогда же кафедре «Автоматизированные технологические системы».

Второй авиационно-технологический факультет готовил инженеров по трем специальностям: «Машины и технология литейного производства», «Машины и обработка металлов давлением», «Оборудование и технология сварочного производства». На факультете было также пять кафедр: «Машины и обработка металлов давлением», «Оборудование и технология сварочного производства», «Машины и технология литейного производства» (образовалась в 1981 году), «Общая технология и металловедение», «Начертательная геометрия и черчение».



Кафедра общей технологии и металловедения, 1979 год

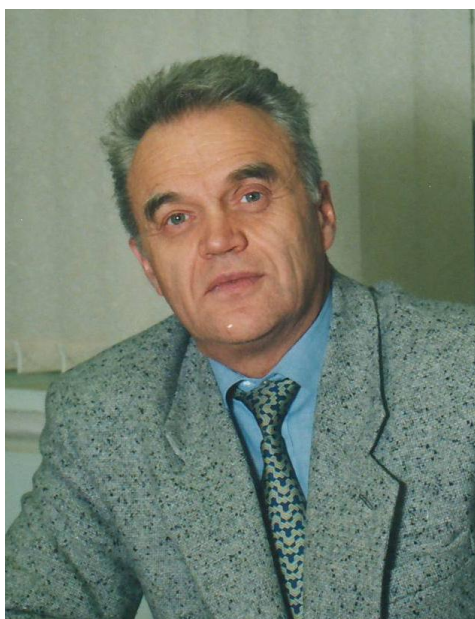
В 1991 году эти факультеты вновь были объединены в один факультет авиационно-технологических систем. Были открыты новые направления и специальности подготовки: «Мехатроника и робототехника», «Наноинженерия», «Технологические машины и оборудование», «Материаловедение и технология материалов», «Стандартизация и метрология», «Физика металлов», «Машины и технологии высокоэффективных процессов обработки материалов», «Проектирование технологических машин и комплексов», «Реновация средств и объектов материального производства в машиностроении». На факультете появились кафедры «Стандартизация и сертификация» и «Мехатронные станочные системы».

В 2016 году статус факультета авиационно-технологических систем был повышен, и он был преобразован в Институт авиационных технологий и материалов. Помимо кафедр в состав института вошли Научно-исследовательский институт физики перспективных материалов и Центр коллективного пользования научным и технологическим оборудованием «Нанотех».

Сегодня ИАТМ представляет собой крупное научно-образовательное подразделение УГАТУ, где ведется подготовка бакалавров, инженеров и магистров по многим направлениям

Научные школы ИАТМ

Институт авиационных технологий и материалов (ИАТМ) богат своими научными школами в различных областях науки и технологии. Исторически особое место занимает материаловедческое направление. Одной из старейших и признанных во всем мире ведущей научной школой в этой области является школа доктора технических наук, профессора Оскара Акрамовича Кайбышева (1939–2017). Она основана на исследованиях в области прочности и пластичности конструкционных металлических материалов и внесла уникальный вклад в технологию формирования различных металлических, интерметаллидных и композиционных материалов.



О.А. Кайбышев, доктор технических наук, профессор

Своими исследованиями О.А. Кайбышев показал и доказал универсальность явления сверхпластичности для любого промышленного материала, включая металлы и сплавы, интерметаллические материалы и керамику, разработал физическую теорию микромеханизма сверхпластической деформации. Совместно с соавторами было установлено, что захват границами зерен решеточных дислокаций в условиях горячей деформации материалов придает границам новые энергетические и кинетические свойства, что явилось открытием нового физического явления в соавторстве с профессором Р.З. Валиевым (1985 год). О.А. Кайбышев показал существование низкотемпературной и высокоскоростной сверхпластичности; развитие кооперированного зернограницного проскальзывания и самоорганизации процесса деформации.

Начальной базой проведения этих исследований явилась кафедра «Общая технология и материаловедение», куда О.А. Кайбышев пришел в 1967 году в качестве старшего преподавателя, заведующим кафедрой тогда была кандидат технических наук А.Н. Нехаева. В 1969 году О.А. Кайбышев стал заведующим кафедрой ОТиМ и проработал на этой должности рекордные для УАИ 36 лет. В 1974 году в возрасте 35 лет он стал доктором технических наук.

В этот период проявились блестящие организаторские способности О.А. Кайбышева, было создано целое научное направление, посвященное изучению проблем сверхпластичности металлов и сплавов, и соответствующая научная школа, в недрах которой под его руководством были подготовлены 15 докторов наук, более 50 кандидатов наук, опубликованы более 500 научных трудов, десятки монографий, созданы более 200 изобретений.

В характере О.А. Кайбышева всегда присутствовало стремление соединить научные достижения с практикой, для чего на базе кафедры в 1976 году была создана отраслевая проблемная лаборатория «Сверхпластичность», в 1978 году – отраслевая лаборатория высокотемпературных турбин, а в 1980 году – специальное конструкторско-технологическое бюро «Тантал», которое стало работать в тесном контакте с промышленными предприятиями.

Наиболее яркие вехи научно-организационной деятельности Оскара Акрамовича – основание в 1986 году Института проблем сверхпластичности металлов СССР, директором которого он являлся до 2005 года, и организация в 1991 году Академии наук Республики Башкортостан.

Под руководством профессора О.А. Кайбышева был разработан ряд новых ресурсосберегающих технологических процессов с использованием эффекта сверхпластичности. Среди них изготовление точных заготовок с минимальными допусками методами объемной штамповки, технология изготовления дисков автомобильных колес с использованием жидкой штамповки, изготовление сложнопольных и крупногабаритных изделий методом локальной деформации в режиме сверхпластичности и другие. И сегодня уникальная экспериментальная база института позволяет решать актуальные проблемы материаловедения, возникающие при разработке перспективной техники XXI века.

На базе пионерских работ профессора О.А. Кайбышева создавались новые научные направления в области материаловедения. Ярким примером этого является научная школа доктора физико-математических наук, профессора Руслана Зуфаровича Валиева, которая внесла существенный вклад в физику сверхпластичности материалов, создание научных основ наноструктурирования металлов и сплавов, используя интенсивные пластические деформации (ИПД), открытие неравновесных границ зерен в поли- и нанокристаллических материалах и развитие моделей их описания.

Профессор Р.З. Валиев является автором свыше 700 статей в ведущих российских и международных научных журналах, а также автором более 12 широко известных монографий, учебников и специальных выпусков и обзоров. Эти работы получили неоспоримое мировое признание. Р.З. Валиев входит в число наиболее цитируемых российских ученых и последние пять лет занимает 6–8 позиции в списке наиболее цитируемых ученых мира в области современного материаловедения.

Весьма важный вклад Р.З. Валиев внес в разработку физики сверхпластичности материалов. Уже в ранних работах им были количественно оценены вклады зернограницного проскальзывания, диффузионной ползучести и дислокационного скольжения в общую деформацию в условиях сверхпластичности. Эти данные легли в основу современных представлений о природе сверхпластической деформации и были использованы при открытиях новых явлений сверхпластического поведения – эффектов низкотемпературной и высокоскоростной сверхпластичности.

Еще одним принципиальным результатом явилось обнаружение и детальное исследование неравновесных границ зерен в поликристаллических, а впоследствии и нанокристаллических металлах и сплавах. Было впервые показано, что характерными признаками таких границ зерен являются избыточная свободная энергия при заданных кристаллографических параметрах, дальнедействующие напряжения и повышенный свободный объем, а природа неравновесных границ зерен связана с их взаимодействием с решеточными дислокациями.

Именно исследования профессора Р.З. Валиева в сотрудничестве с профессором И.В. Александровым в начале 1990-х годов по наноструктурированию металлов и сплавов с использованием интенсивных пластических деформаций (ИПД), т. е. больших деформаций в условиях высоких приложенных давлений, явились основой развития нового направления в материаловедении, связанного с разработкой объемных наноструктурных материалов. Они первыми продемонстрировали, что обработка материалов методами ИПД приводит к исключительному измельчению зерен, открывая потенциал для достижения уникальных свойств. В конце 1990-х – начале 2000-х годов эти работы вызвали повышенный интерес в десятках лабораторий США, Японии и многих стран Европы и Азии. Публикация авторов, посвященная принципам наноструктурирования металлов методами ИПД, была процитирована более 2500 раз.

Совместные работы профессоров Р.З. Валиева и И.В. Александрова позволили открыть новые законо-

мерности эволюции микроструктур в ГЦК, ОЦК и ГПУ металлах, особенности формирования ультрамелкозернистых структур с большеугловыми границами зерен, фазовые превращения, связанные с разупрочнением, аморфизацией в процессах интенсивной пластической деформации.

Ряд их монографий переведены на английский и китайский языки. В 2015 году за цикл работ «Разработка, исследование и применение новых нанокристаллических материалов» профессорам И.В. Александрову, Р.З. Валиеву, Р.К. Исламгалиеву и профессору университетов Южной Калифорнии и Саутгемптона Т.Д. Лэнгдону была присуждена Государственная премия Республики Башкортостан в области науки и техники.

Научно-методологической базой повышения свойств наноструктурных материалов является разработанный профессором Р.З. Валиевым подход, названный зернограницной инженерией, суть которого заключается в управлении свойствами наноматериалов за счет изменения структуры границ зерен (доли мало- и большеугловых границ, образования специальных и произвольных, равновесных и неравновесных границ зерен, а также формирования зернограницных сегрегаций и выделений) путем варьирования режимов – температуры, степени, скорости интенсивной пластической деформации. Эти и другие уникальные результаты и публикации способствовали распространению обработки материалов методами ИПД по всему миру, сделав ее одной из наиболее значимых тем в современном материаловедении и предметом исследований практически во всех крупных материаловедческих лабораториях и центрах разных стран.

Проводимые работы имеют также большой инновационный потенциал. Сотрудниками ИАТМ показана возможность повышения свойств за счет наноструктурирования методами ИПД таких промышленно важных материалов, как Al-, Ti-, Cu-сплавы, а также сталей, что весьма перспективно для их использования в качестве материалов следующего поколения, в частности для работы в условиях экстремальных воздействий – авиакосмической технике, энергетике, медицине. Например, наноструктурные алюминиевые сплавы с прочностью около 1000 МПа, т. е. значительно выше прочности углеродистых сталей, представляют непосредственный интерес для многих ответственных изделий в авиадвигателестроении, автомобильной промышленности.

В настоящее время активно развивается школа компьютерного моделирования и создания предиктивных цифровых технологий. Руководителем данного направления является профессор кафедры материаловедения и физики металлов Е.А. Корзникова. Данная школа поддерживается Советом по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации. В рамках школы ведется исследование влияния экстремальных воздействий на структуру и свойства материала, а также путей повышения их стабильности в неравновесных условиях.

Институт авиационных технологий и материалов активно взаимодействует с ведущими авиационными

предприятиями Республики Башкортостан и Российской Федерации. Ведется совместная подготовка научно-методических и учебных материалов, предприятия предоставляют площади и оборудование для проведения практических и лабораторных работ, содействуют студенческим научно-исследовательским работам. Сотрудничество реализуется в материальных и финансовых вопросах, в заключении хозяйственных

договоров на научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы, осуществлении целевой подготовки студентов, создании на предприятии базовых кафедр.

Таким образом, интеграция науки, производства и образовательного процесса в ИАТМ являются основой подготовки высококвалифицированных кадров для высокотехнологичного производства.

Зарипов Наиль Гарифьянович, доктор физико-математических наук, профессор
Корзникова Елена Александровна, доктор физико-математических наук, профессор
Хусаинов Юлдаш Гамирович, кандидат технических наук, доцент

Моделирование механических и физических свойств пучка углеродных нанотрубок при поперечном сжатии с использованием цепной модели с редуцированным числом степеней свободы

© 2022

Абдуллина Дина Ураловна^{*1,4}, магистр кафедры материаловедения и физики металлов
Галияхметова Лейсан Халиловна^{2,5}, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник
Бебихов Юрий Владимирович^{3,6}, кандидат физико-математических наук, доцент

¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа (Россия)

³Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Мирный (Россия)

*E-mail: dina.abdullina25@gmail.com

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6010-6921>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Поступила в редакцию 25.04.2022

Принята к публикации 12.09.2022

Аннотация: В работе исследуется пучок ориентированных углеродных нанотрубок (УНТ) при поперечном сжатии в условиях плоской деформации в рамках молекулярно-динамической модели с уменьшенным числом степеней свободы. Модель учитывает растяжение и изгиб стенки УНТ, а также вандерваальсовы взаимодействия. Каждая УНТ представлена кольцом атомов, имеющим две степени свободы в плоскости кольца. Дискретный характер модели позволяет описать большую кривизну стенки УНТ и разрушение УНТ при очень высоком давлении. Получены равновесные структуры кристалла УНТ при двухосном нагружении, контролируемом деформацией. Отдельные УНТ достаточно большого диаметра имеют два равновесных состояния – с круглым и слопнутым поперечным сечением. УНТ малого диаметра в свободном состоянии могут иметь только круговое поперечное сечение. Установлено наличие двух качественных структурных трансформаций, наблюдаемых при двухосном сжатии пучка УНТ. Первая трансформация, аналогичная фазовому переходу второго рода, приводит к эллиптизации поперечных сечений УНТ. В результате второй трансформации типа фазового перехода первого рода в пучке появляются слопнутые УНТ, доля которых постепенно растет с увеличением деформации сжатия. Рассчитаны константы упругости пучка, такие как модули Юнга, модуль сдвига и коэффициенты Пуассона. Показано, что одна из равновесных структур (с эллиптическими поперечными сечениями УНТ) обладает свойством частичного ауксетика, то есть имеет отрицательный коэффициент Пуассона при одноосном нагружении в определенном направлении. Предлагаемая цепная модель может быть эффективно применена для анализа физических и механических свойств пучков одностенных или многостенных УНТ в условиях плоской деформации, а после простых модификаций может применяться также к аналогичным структурам, изготовленным из других двумерных наноматериалов.

Ключевые слова: ауксетик; пучок углеродных нанотрубок; упругие свойства; поперечное сжатие; цепная модель.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и при государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации, грант НШ-4320.2022.1.2.

Для цитирования: Абдуллина Д.У., Галияхметова Л.Х., Бебихов Ю.В. Моделирование механических и физических свойств пучка углеродных нанотрубок при поперечном сжатии с использованием цепной модели с редуцированным числом степеней свободы // *Frontier Materials & Technologies*. 2022. № 3. С. 15–22. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-15-22.

ВВЕДЕНИЕ

Существует большое разнообразие углеродных полиморфов, включающее широкий класс sp^2 -структур, таких как фуллерены, углеродные нанотрубки (УНТ) и графен. Относительно слабые силы Ван-дер-Ваальса дополнительно создают множество вторичных структур, причем некоторые из них могут иметь дальний порядок, например кристалл фуллерита, графита и кристаллы УНТ. Кристаллические структуры Ван-дер-Ваальса интересны тем, что они обладают свойствами, не проявляемыми изолированными структурными элементами. Это исследование сосредоточено на механических свойствах пучков УНТ. Механическое применение УНТ включает производство канатов, волокон, полимерно-матричных и металломатричных композитов, твердых смазочных материалов и т. д. Во всех областях применения УНТ демонстрируют превосходные механические свойства: предел прочности при растяжении в диапазоне от 11 до 63 ГПа, модуль упругости Юнга в интервале от 1,0 до 1,3 ТПа, высокую деформируемость вплоть до предела деформации разрушения около 10 %. Кроме того, УНТ легкие, гибкие, имеют высокую тепловую и электрическую проводимость [1]. Несмотря на то, что их фактическая прочность на порядок ниже теоретически прогнозируемого значения, из-за

механических свойствах пучков УНТ. Механическое применение УНТ включает производство канатов, волокон, полимерно-матричных и металломатричных композитов, твердых смазочных материалов и т. д. Во всех областях применения УНТ демонстрируют превосходные механические свойства: предел прочности при растяжении в диапазоне от 11 до 63 ГПа, модуль упругости Юнга в интервале от 1,0 до 1,3 ТПа, высокую деформируемость вплоть до предела деформации разрушения около 10 %. Кроме того, УНТ легкие, гибкие, имеют высокую тепловую и электрическую проводимость [1]. Несмотря на то, что их фактическая прочность на порядок ниже теоретически прогнозируемого значения, из-за

неизбежных дефектов в течение почти 30 лет они были признаны самым прочным материалом из когда-либо известных. Уникальное сочетание свойств делает УНТ идеальным вариантом для применения в искусственных мышцах, доставке лекарств в поврежденный участок тела, резонаторах, проектах космических лифтов, хранения и сборе энергии и т. д. Еще одним важным преимуществом УНТ является их относительно простое изготовление для получения широкого диапазона геометрических характеристик (диаметра, длины и хиральности) [2; 3], которые можно экстраполировать на синтез пучков УНТ [4]. Материал этого типа, также называемый лесом УНТ, обладает даже более высокими механическими свойствами, чем отдельные нанотрубки, из-за вандерваальсовых взаимодействий между ними [5]. В исследовании [6] были теоретически и экспериментально изучены механические свойства пучков УНТ, выровненных в жидкой среде с использованием внешнего электрического поля. Пучки УНТ под действием растягивающей нагрузки можно моделировать, предполагая, что нанотрубки жесткие.

Метод молекулярной динамики (МД) является наиболее популярным методом исследования из-за его универсальности и доступности, т. к. он зарекомендовал себя как эффективный инструмент анализа различных аспектов трансформации кристаллических решеток в результате внешних воздействий [7–9]. Недостатком метода МД при исследовании пучков УНТ является необходимость учета большого количества степеней свободы, что требует трудоемких вычислений.

В [10] были разработаны модели с уменьшенным числом степеней свободы. В работе рассматривается цепная модель, движущаяся по плоскости, которая ранее была показана как эффективный инструмент для рассмотрения углеродных наносвитков, намотки графеновых нанолент вокруг УНТ, бокового сжатия жгутов

УНТ, динамики рипплокаций (ripplocations) и ротобризеров, собственных частот изгибных колебаний УНТ.

Материалы со сложными структурными элементами, например частицы с вращательными степенями свободы, часто проявляют аномальные механические и физические свойства, такие как отрицательные коэффициенты Пуассона, отрицательное тепловое расширение или отрицательную сжимаемость [11–13].

Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона называются ауксетиками [14]. Такие материалы расширяются в поперечном направлении при одноосном растяжении. Об ауксетичности нано- и микротрубок, изготовленных из орторомбических кристаллов, сообщалось в исследовании [15].

Ауксетическое поведение может быть продемонстрировано макроскопическими трубчатыми структурами, а также микроскопическими и наноскопическими структурами. Дефектные УНТ проявляют ауксетическое поведение, что приводит к повышению энергии отрыва в композите УНТ-полиэтилен [16].

В наших предыдущих работах по боковому сжатию пучков УНТ была разработана цепная модель [17], проанализированы демпфирующие свойства пучков [18] и приведены структурные характеристики пучков УНТ при двухосном сжатии [19].

Цель работы – проведение детального анализа механических свойств пучков углеродных нанотрубок при поперечном сжатии в условиях плоской деформации.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Вычислительная модель, использованная в исследовании, схематически показана на рис. 1. Пучок нанотрубок выровнен вдоль оси z , а УНТ одинакового диаметра образуют в поперечном сечении треугольную решетку. УНТ нумеруются индексами $i=1, \dots, I$

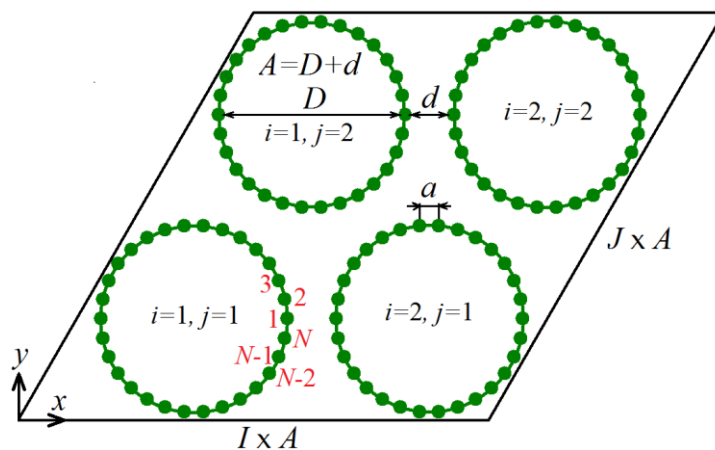


Рис. 1. Схема вычислительной ячейки, включающей пучок УНТ $I \times J$ ($I=10, J=12$ в работе и $I=J=2$ на рисунке), пронумерованная индексами $i=1, \dots, I$ и $j=1, \dots, J$.

Углеродные нанотрубки в поперечном сечении образуют треугольную решетку.

Атомы имеют две степени свободы, составляющие вектора смещения в плоскости (x, y) .

Цепочки атомов, нормальные к плоскости (x, y) , движутся как твердые тела

Fig. 1. Diagram of a computation cell including a CNT bundle $I \times J$ ($I=10, J=12$ in the work and $I=J=2$ in figure) indexed as $i=1, \dots, I$ and $j=1, \dots, J$. CNTs in the cross section form a triangle lattice.

Atom chains normal to the plane (x, y) are moving as solid bodies

Atom chains normal to the plane (x, y) are moving as solid bodies

и $j=1, \dots, J$ (показан случай $I=J=2$), в работе мы принимаем $I=10, J=12$. Атомы углерода движутся в плоскости (x, y) , каждый атом представляет собой жесткий ряд атомов, ориентированный перпендикулярно плоскости (x, y) . Внутри каждой УНТ атомы углерода пронумерованы индексом $n=1, \dots, N$ против часовой стрелки, начиная с атома с максимальной x -координатой. Таким образом, общее число атомов в вычислительной ячейке равно $I \times J \times N=3600$. В работе боковое сжатие пучка УНТ рассматривается в условиях плоской деформации, что означает, что каждый атом углерода обозначает жесткий атомный ряд, ориентированный вдоль оси z , и движущийся как твердое тело на плоскости (x, y) . Каждый атом имеет две степени свободы – компоненты вектора смещения на плоскости (x, y) . Позиции атомов определяются радиус-векторами $r_{ijn}=(x_{ijn}, y_{ijn})$. Вычислительная ячейка имеет форму параллелограмма со сторонами $I \times A$ и $J \times A$, где A – расстояние между центрами соседних УНТ. Периодические граничные условия накладываются в обоих направлениях.

Межатомное расстояние в графене $\rho=1,418 \text{ \AA}$. Расстояние между соседними атомными рядами в зигзагообразной УНТ составляет $a=\rho\sqrt{3}/2=1,228 \text{ \AA}$, оно же – расстояние между атомами в модели цепочки (рис. 1). Диаметр углеродных нанотрубок составляет $D=a/\sin(\pi/N)$. Пусть d – кратчайшее расстояние между стенками УНТ, тогда расстояние между центрами соседних УНТ составляет $A=D+d$. Сторонами вычислительной ячейки в форме параллелограмма являются $I \times A$ и $J \times A$. В наших моделях рассматривается УНТ с $N=30$, диаметром $D=11,75 \text{ \AA}$ и равновесным значением $d=3,088 \text{ \AA}$. Единицами измерения расстояния, энергии и времени являются ангстрем, эВ и пикосекунда соответственно. Используя эти единицы измерения, массу атома углерода можно считать равной $M=12 \times 1,0364 \times 10^{-4} \text{ эВ} \cdot \text{пс}^2 \cdot \text{\AA}^{-2}$.

Динамика пучка УНТ описывается гамильтонианом (полная энергия)

$$H = K + U_B + U_A + U_{vdW},$$

где четыре члена в правой части обозначают кинетическую энергию системы, энергию валентных связей,

энергию валентных углов и энергию вандерваальсовых взаимодействий соответственно. Способы расчета этих четырех типов энергий подробно описаны в нашей работе с открытым доступом [17] и здесь не воспроизводятся. Модель была успешно использована для описания структуры и специфических механических свойств пучков УНТ и других углеродных 2D-материалов [10].

Закон Гука для плоской деформации принимается в виде

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix},$$

где C_{ij} – коэффициенты матрицы жесткости.

Упругие константы можно найти следующим образом:

$$v_{xy} = \frac{C_{21}}{C_{22}}; v_{yx} = \frac{C_{12}}{C_{11}}; G_{xy} = C_{33};$$

$$E_{xx} = C_{11}(1 - v_{xy}v_{yx}); E_{yy} = C_{22}(1 - v_{xy}v_{yx}),$$

где v_{xy} и v_{yx} – коэффициенты Пуассона;

G_{xy} – модуль касательного сдвига;

E_{xx} и E_{yy} – касательные модули Юнга вдоль осей x и y соответственно.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 2 показана эволюция структуры пучка УНТ для двухосного сжатия. Для структур с трансляционной симметрией ячейки трансляции выделены параллелограммом. При $|\theta|=0,07$ видны структуры с трансляционной симметрией, где УНТ имеют одинаковое сечение. На рис. 2 а УНТ слегка полигонизированы, что едва заметно в масштабе рисунка. При $|\theta|=0,08$ наблюдается качественное изменение структуры. Трансляционная симметрия сохраняется, но размер трансляционной ячейки отличается от такового в случае $|\theta|=0,07$. На рис. 2 б период удваивается в одном направлении, и ячейка трансляции включает две УНТ.

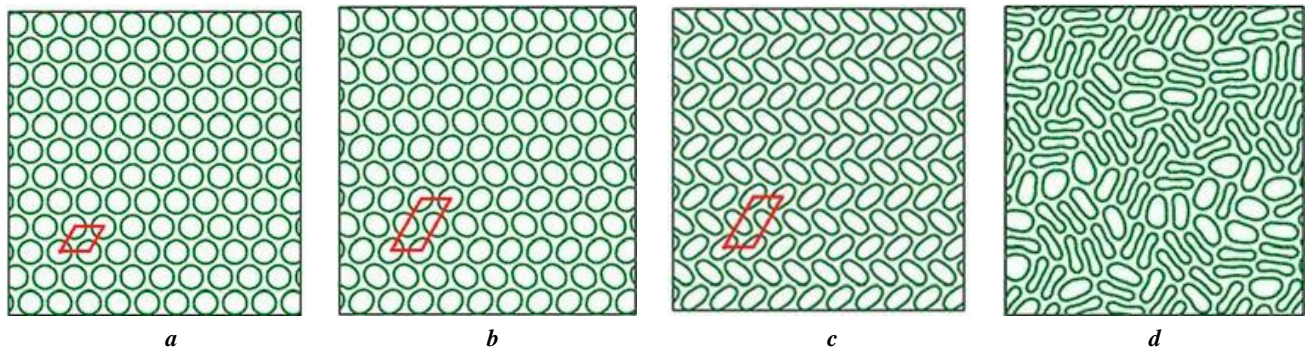


Рис. 2. Эволюция структуры пучка УНТ при двухосном сжатии

a – $|\theta|=0,07$; **b** – $|\theta|=0,08$; **c** – $|\theta|=0,15$; **d** – $|\theta|=0,30$.

Для структур с трансляционной симметрией параллелограммом выделены ячейки трансляции

Fig. 2. CNT bundle structure evolution at biaxial compression

a – $|\theta|=0,07$; **b** – $|\theta|=0,08$; **c** – $|\theta|=0,15$; **d** – $|\theta|=0,30$.

For structures with translation symmetry, parallelogram indicates the translation cells

Дальнейшее увеличение деформации сжатия приводит к постепенному схлопыванию нанотрубок, и по достижении деформации $|\theta|=0,30$ все УНТ оказываются схлопнутыми. На рис. 2 с при $|\theta|=0,15$ трансляционная симметрия еще сохраняется, для двухосного сжатия разрушение нанотрубок начинается при $|\theta|=0,151$. На рис. 2 d при $|\theta|=0,30$ можно наблюдать, что доля неразрушенных УНТ невелика.

Зависимость коэффициентов Пуассона ν_{xy} и ν_{yx} от объемной деформации $|\theta|$ для двухосного сжатия показана на рис. 3. Из анализа графика на рис. 3 видно, что вначале ν_{xy} и ν_{yx} почти равны и приближаются к 1 с увеличением объемной деформации. Равенство $\nu_{xy}=\nu_{yx}$ следует из изотропии структуры. Для изотропного 2D-материала закон сохранения энергии предполагает, что коэффициент Пуассона должен быть в пределах $-1 \leq \nu \leq 1$. Становится понятно, что причиной трансфор-

мации структуры при переходе от этапа I к этапу II является приближение коэффициента Пуассона к предельному значению 1.

Коэффициенты Пуассона на этапе II заметно отличаются от коэффициентов на этапе I. В точке перехода наблюдается резкое падение как ν_{xy} , так и ν_{yx} . Один из коэффициентов Пуассона остается положительным, а другой становится отрицательным, что указывает на то, что структура сжатого с боков пучка УНТ на этапе II проявляет частичные ауксетические свойства. Для двухосного сжатия значение $\nu_{yx} < 0$.

Чтобы определить механическое поведение деформированного пучка УНТ, на рис. 4 анализируются значения касательного модуля Юнга и касательного модуля сдвига G . На этапе I E_{xx} и E_{yy} растут линейно с увеличением $|\theta|$. Модуль касательного сдвига G также увеличивается при деформации сжатия, но остается в 4,5 раза

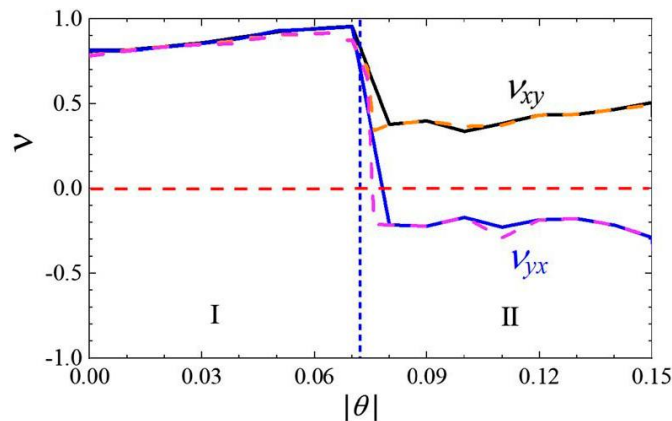


Рис. 3. Коэффициент Пуассона как функции объемной деформации сжатия при двухосном сжатии. Сплошные линии показывают ν_{xy} (ν_{yx}). Вертикальные пунктирные линии отделяют этап I от этапа II.

Fig. 3. The Poisson's ratio as a function of bulk compression strain at biaxial compression. Solid lines indicate ν_{xy} (ν_{yx}). Vertical dotted lines separate stage I from stage II.

A horizontal dotted line indicates the Poisson's ratio zero value

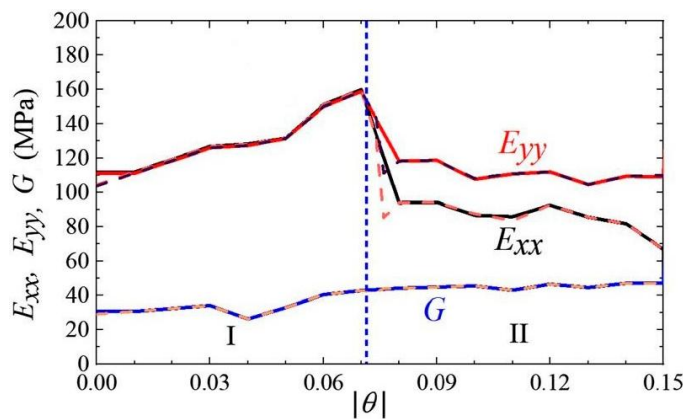


Рис. 4. Касательные модули Юнга и касательные модули сдвига при двухосном сжатии.

Две верхние сплошные линии показывают E_{xx} (E_{yy}), а нижняя сплошная линия – модуль касательного сдвига G . Вертикальная пунктирная линия отделяет этап I от этапа II

Fig. 4. Tangent Young's moduli and tangent shear moduli at biaxial compression.

Two upper solid lines indicate E_{xx} (E_{yy}) and the bottom solid line – tangent shear module G .

Vertical dotted line separates the stage I from the stage II

меньше, чем касательные модули Юнга. Переход от этапа I к этапу II приводит к резкому падению касательных модулей Юнга. После падения на этапе II E_{xx} меньше, чем E_{yy} для двухосного сжатия.

Для двухосного сжатия, как показано на рис. 3, модуль касательного сдвига остается почти постоянным в пределах этапа II, при переходе от этапа I к этапу II модуль сдвига не изменяется.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Анализ упругих свойств пучка УНТ при плоскостном деформационном боковом сжатии проведен методом возмущения-релаксации МД в рамках цепной модели с уменьшенным числом степеней свободы. Анализировалось двухосное сжатие. Схема нагружения изображена на рис. 2. Можно выделить четыре стадии.

Стадия I: слегка деформированные УНТ образуют кристаллические структуры с одной УНТ в трансляционной ячейке. Наблюдаются слегка полигонизированные УНТ (рис. 2 а).

Стадия II: УНТ, имеющие эллиптические поперечные сечения, образуют кристаллические структуры с удвоенными трансляционными ячейками. Ячейка трансляции включает две УНТ (рис. 2 б).

Стадия III: в структуре появляются схлопнутые УНТ, доля схлопнутых УНТ увеличивается с увеличением деформации сжатия (рис. 2 с).

Стадия IV: Все УНТ схлопываются.

Наблюдаемое ауксетичное поведение кристаллических структур пучка УНТ на стадии II не может быть объяснено механизмом вращения звеньев [20; 21], так как заметного вращения сечений УНТ обнаружено не было. Частичная ауксетичность обычно наблюдается в сильно анизотропных материалах [22; 23]. Было также установлено, что сценарий эволюции структурных единиц массива нанотрубок в значительной степени зависит от скорости деформирования [24; 25], их хиральности [25], взаимной упорядоченности нанотрубок внутри пучка [26] и при определенных условиях внешнего воздействия может приводить к возникновению валентных связей между трубками [27].

Анизотропия рассматриваемого пучка УНТ на стадии II, в которой наблюдается частичная ауксетичность, невелика и вряд ли может быть причиной ауксетичных свойств. Возможно, механизм ауксетичности пучка УНТ как наноматериала аналогичен пене и другим подобным микроскопическим и макроскопическим структурам. Дальнейшее изучение влияния температуры и расположения УНТ на механические свойства пучка оставлено для будущих исследований. В целом полученные данные о структуре и упругих свойствах пучков УНТ при боковом сжатии способствуют пониманию механизмов деформации конструкций пучкового типа и служат ориентиром для проектирования материалов с заданными механическими свойствами.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Рассчитаны упругие константы как функции объемной деформации: коэффициенты Пуассона ν_{xy} и ν_{yx} , модули Юнга E_{xx} , E_{yy} и модуль сдвига G для пучка УНТ при поперечном сжатии для этапов I и II.

2. На этапе I пучок УНТ имеет коэффициенты Пуассона, близкие к 1 и приближающиеся к 1 при увеличении объемной деформации сжатия. Для изотропного упругого 2D-материала коэффициент Пуассона не может превышать 1, так как неустойчивость конструкции при единичном УНТ внутри поступательной ячейки возникает, когда коэффициент Пуассона приближается к 1. Переход к структуре с двойной поступательной ячейкой действительно происходит при объемной деформации около 7 %.

3. Пучок УНТ при сжатии в пределах этапа II проявляет частичные ауксетические свойства. При двухосном сжатии $\nu_{xy} > 0$ и $\nu_{yx} < 0,4$, модуль Юнга и модуль сдвига линейно растут с деформацией сжатия на этапе I, при этом G в 4,5 раза меньше, чем E_{xx} и E_{yy} . На этапе II модули Юнга E_{xx} и E_{yy} заметно меньше, чем на этапе I. Модуль сдвига на этапах I и II практически одинаков при двухосном сжатии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yu M.-F. Fundamental mechanical properties of carbon nanotubes: Current understanding and the related experimental studies // *Journal of Engineering Materials and Technology*. 2004. Vol. 126. № 3. P. 271–278. DOI: [10.1115/1.1755245](https://doi.org/10.1115/1.1755245).
2. Bai Y., Zhang R., Ye X., Zhu Zh., Xie H., Shen B., Cai D., Liu B., Zhang Ch., Jia Z., Zhang Sh., Li X., Wei F. Carbon nanotube bundles with tensile strength over 80 GPa // *Nature Nanotechnology*. 2018. Vol. 13. № 7. P. 589–595. DOI: [10.1038/s41565-018-0141-z](https://doi.org/10.1038/s41565-018-0141-z).
3. Di J., Fang S., Moura F.A., Galvão D.S., Bykova J., Aliev A., de Andrade M.J., Lepró X., Li Na., Haines C., Ovalle-Robles R., Qian D., Baughman R.H. Strong, twist-stable carbon nanotube yarns and muscles by tension annealing at extreme temperatures // *Advances Materials*. 2016. Vol. 28. № 31. P. 6598–6605. DOI: [10.1002/adma.201600628](https://doi.org/10.1002/adma.201600628).
4. Li Y., Zhang X., Tao X., Xu J., Huang W., Luo J., Luo Z., Li T., Liu F., Bao Y., Geise H.J. Mass Production of High-Quality Multi-Walled Carbon Nanotube Bundles on a Ni/Mo/MgO Catalyst // *Carbon*. 2005. Vol. 43. № 2. P. 295–301. DOI: [10.1016/j.carbon.2004.09.014](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.09.014).
5. Rakov E.G. Materials made of carbon nanotubes. The carbon nanotube forest // *Russian Chemical Reviews*. 2013. Vol. 82. № 6. P. 538–566. DOI: [10.1070/RC2013v082n06ABEH004340](https://doi.org/10.1070/RC2013v082n06ABEH004340).
6. Karimzad Ghavidel A., Zadshakoyan M., Arjmand M. Mechanical analysis of aligned carbon nanotube bundles under electric field // *International Journal of Mechanical Sciences*. 2021. Vol. 196. Article number 106289. DOI: [10.1016/j.ijmecsci.2021.106289](https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2021.106289).
7. Korznikova E.A., Shcherbinin S.A., Ryabov D.S., Chechin G.M., Ekomasov E.G., Barani E., Zhou K., Dmitriev S.V. Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Graphene: Second Harmonic Generation and Negative Pressure // *Physica Status Solidi (B) Basic Research*. 2019. Vol. 256. № 1. Article number 1800061. DOI: [10.1002/pssb.201800061](https://doi.org/10.1002/pssb.201800061).
8. Fitzgerald S.P. Structure and dynamics of crowdion defects in bcc metals // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*. 2018. Vol. 3. № 3–4. Article number 1840003. DOI: [10.1142/S2424913018400039](https://doi.org/10.1142/S2424913018400039).

9. Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M.G. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices // *Computational Condensed Matter*. 2017. Vol. 13. P. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).
10. Savin A.V., Mazo M.A. Two-Dimensional Model of Scrolled Packings of Molecular Nanoribbons // *Physics of the Solid State*. 2018. Vol. 60. № 4. P. 826–835. DOI: [10.1134/S1063783418040297](https://doi.org/10.1134/S1063783418040297).
11. Dudek K., Attard D., Caruana-Gauci R., Wojciechowski K.W., Grima J.N. Unimode metamaterials exhibiting negative linear compressibility and negative thermal expansion // *Smart Materials and Structures*. 2016. Vol. 25. № 2. Article number 025009. DOI: [10.1088/0964-1726/25/2/025009](https://doi.org/10.1088/0964-1726/25/2/025009).
12. Dudek K., Gatt R., Mizzi L., Dudek M., Attard D., Evans K.E., Grima J.N. On the dynamics and control of mechanical properties of hierarchical rotating rigid unit auxetics // *Scientific Reports*. 2017. Vol. 7. Article number 46529. DOI: [10.1038/srep46529](https://doi.org/10.1038/srep46529).
13. Gatt R., Mizzi L., Azzopardi J.I., Azzopardi K.M., Attard D., Casha A., Briffa J., Grima J.N. Hierarchical Auxetic Mechanical Metamaterials // *Scientific Reports*. 2015. Vol. 5. Article number 8395. DOI: [10.1038/srep08395](https://doi.org/10.1038/srep08395).
14. Alderson K.L., Alderson A., Grima J.N., Wojciechowski K.W. Auxetic Materials and Related Systems // *Physica Status Solidi (B) Basic Research*. 2014. Vol. 251. № 2. P. 263–266. DOI: [10.1002/pssb.201470114](https://doi.org/10.1002/pssb.201470114).
15. Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S., Volkov M.A. Auxeticity in nano/microtubes produced from orthorhombic crystals // *Smart Materials and Structures*. 2016. Vol. 25. № 5. Article number 054006. DOI: [10.1088/0964-1726/25/5/054006](https://doi.org/10.1088/0964-1726/25/5/054006).
16. Zhang J., Jiang D., Scarpa F., Peng H.-X. Enhancement of pullout energy in a single-walled carbon nanotube-polyethylene composite system via auxetic effect // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. 2013. Vol. 55. P. 188–194. DOI: [10.1016/j.compositesa.2013.09.006](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2013.09.006).
17. Korznikova E.A., Rysaeva L.Kh., Savin A.V., Soboleva E.G., Ekomasov E.G., Ilgamov M.A., Dmitriev S.V. Chain Model for Carbon Nanotube Bundle under Plane Strain Conditions // *Materials*. 2019. Vol. 12. № 23. Article number 3951. DOI: [10.3390/ma12233951](https://doi.org/10.3390/ma12233951).
18. Rysaeva L.K., Korznikova E.A., Murzaev R.T., Abdullina D.U., Kudreyko A.A., Baimova J.A., Lisovenko D.S., Dmitriev S.V. Elastic damper based on the carbon nanotube bundle // *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering*. 2020. Vol. 18. № 1. P. 1–12. DOI: [10.22190/FUME200128011R](https://doi.org/10.22190/FUME200128011R).
19. Abdullina D.U., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Laptev D.V., Kudreyko A.A., Soboleva E.G., Dmitriev S.V., Zhou K. Mechanical Response of Carbon Nanotube Bundle to Lateral Compression // *Computation*. 2020. Vol. 8. № 2. Article number 27. DOI: [10.3390/computation8020027](https://doi.org/10.3390/computation8020027).
20. Vasiliev A.A., Dmitriev S.V., Ishibashi Y., Shigenari T. Elastic properties of a two-dimensional model of crystals containing particles with rotational degrees of freedom // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2002. Vol. 65. № 9. P. 1–7. DOI: [10.1103/PhysRevB.65.094101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.094101).
21. Grima J.N., Alderson A., Evans K.E. Auxetic behaviour from rotating rigid units // *Physica Status Solidi (B) Basic Research*. 2005. Vol. 242. № 3. P. 561–575. DOI: [10.1002/pssb.200460376](https://doi.org/10.1002/pssb.200460376).
22. Tanaka H., Suga K., Iwata N., Shibutani Y. Orthotropic Laminated Open-cell Frameworks Retaining Strong Auxeticity under Large Uniaxial Loading // *Scientific Reports*. 2017. Vol. 7. Article number 39816. DOI: [10.1038/srep39816](https://doi.org/10.1038/srep39816).
23. Harkati E.H., Bezazi A., Boukharouba W., Scarpa F. Influence of carbon fibre on the through-the-thickness NPR behaviour of composite laminates // *Physica Status Solidi (B) Basic Research*. 2009. Vol. 246. № 9. P. 2111–2117. DOI: [10.1002/pssb.200982043](https://doi.org/10.1002/pssb.200982043).
24. Li B., Li S., Shi K., Zhang X., Yang S., Pan D., Liu L., Nan Y., Zhu X., Song X., Su L., Yang G. Structural properties of single-walled carbon nanotubes under extreme dynamic pressures // *Acta Materialia*. 2022. Vol. 228. Article number 117776. DOI: [10.1016/j.actamat.2022.117776](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117776).
25. Wittmaack B.K., Volkov A.N., Zhigilei L.V. Phase transformation as the mechanism of mechanical deformation of vertically aligned carbon nanotube arrays: Insights from mesoscopic modeling // *Carbon*. 2019. Vol. 143. P. 587–597. DOI: [10.1016/j.carbon.2018.11.066](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.11.066).
26. Ferreira R.S., Aguiar A.L., Alencar R.S., San-Miguel A., Filho A.G.S. Flat-to-Flat Polymerization of Single-Walled Carbon Nanotubes under High Pressure Mediated by Carbon Chain Encapsulation // *Journal of Physical Chemistry C*. 2021. Vol. 125. № 23. P. 12857–12869. DOI: [10.1021/acs.jpcc.1c02044](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c02044).
27. Li B., Li S., Shi K., Zhang X., Yang S., Pan D., Liu L., Nan Y., Zhu X., Song X., Su L., Yang G. Structural properties of single-walled carbon nanotubes under extreme dynamic pressures // *Acta Materialia*. 2022. Vol. 228. Article number 117776. DOI: [10.1016/j.actamat.2022.117776](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117776).

REFERENCES

1. Yu M.-F. Fundamental mechanical properties of carbon nanotubes: Current understanding and the related experimental studies. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2004, vol. 126, no. 3, pp. 271–278. DOI: [10.1115/1.1755245](https://doi.org/10.1115/1.1755245).
2. Bai Y., Zhang R., Ye X., Zhu Zh., Xie H., Shen B., Cai D., Liu B., Zhang Ch., Jia Z., Zhang Sh., Li X., Wei F. Carbon nanotube bundles with tensile strength over 80 GPa. *Nature Nanotechnology*, 2018, vol. 13, no. 7, pp. 589–595. DOI: [10.1038/s41565-018-0141-z](https://doi.org/10.1038/s41565-018-0141-z).
3. Di J., Fang S., Moura F.A., Galvão D.S., Bykova J., Aliev A., de Andrade M.J., Lepró X., Li Na., Haines C., Ovalle-Robles R., Qian D., Baughman R.H. Strong, twist-stable carbon nanotube yarns and muscles by tension annealing at extreme temperatures. *Advances Materials*, 2016, vol. 28, no. 31, pp. 6598–6605. DOI: [10.1002/adma.201600628](https://doi.org/10.1002/adma.201600628).
4. Li Y., Zhang X., Tao X., Xu J., Huang W., Luo J., Luo Z., Li T., Liu F., Bao Y., Geise H.J. Mass Production of High-Quality Multi-Walled Carbon Nanotube Bundles on a Ni/Mo/MgO Catalyst. *Carbon*, 2005, vol. 43, no. 2, pp. 295–301. DOI: [10.1016/j.carbon.2004.09.014](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.09.014).

5. Rakov E.G. Materials made of carbon nanotubes. The carbon nanotube forest. *Russian Chemical Reviews*, 2013, vol. 82, no. 6, pp. 538–566. DOI: [10.1070/RC2013v082n06ABEH004340](https://doi.org/10.1070/RC2013v082n06ABEH004340).
6. Karimzad Ghavidel A., Zadshakoyan M., Arjmand M. Mechanical analysis of aligned carbon nanotube bundles under electric field. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2021, vol. 196, article number 106289. DOI: [10.1016/J.IJMECSCI.2021.106289](https://doi.org/10.1016/J.IJMECSCI.2021.106289).
7. Korznikova E.A., Shcherbinin S.A., Ryabov D.S., Chechin G.M., Ekomasov E.G., Barani E., Zhou K., Dmitriev S.V. Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Graphene: Second Harmonic Generation and Negative Pressure. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 2019, vol. 256, no. 1, article number 1800061. DOI: [10.1002/pssb.201800061](https://doi.org/10.1002/pssb.201800061).
8. Fitzgerald S.P. Structure and dynamics of crowdion defects in bcc metals. *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 2018, vol. 3, no. 3-4, article number 1840003. DOI: [10.1142/S2424913018400039](https://doi.org/10.1142/S2424913018400039).
9. Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M.G. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices. *Computational Condensed Matter*, 2017, vol. 13, pp. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).
10. Savin A.V., Mazo M.A. Two-Dimensional Model of Scrolled Packings of Molecular Nanoribbons. *Physics of the Solid State*, 2018, vol. 60, no. 4, pp. 826–835. DOI: [10.1134/S1063783418040297](https://doi.org/10.1134/S1063783418040297).
11. Dudek K., Attard D., Caruana-Gauci R., Wojciechowski K.W., Grima J.N. Unimode metamaterials exhibiting negative linear compressibility and negative thermal expansion. *Smart Materials and Structures*, 2016, vol. 25, no. 2, article number 025009. DOI: [10.1088/0964-1726/25/2/025009](https://doi.org/10.1088/0964-1726/25/2/025009).
12. Dudek K., Gatt R., Mizzi L., Dudek M., Attard D., Evans K.E., Grima J.N. On the dynamics and control of mechanical properties of hierarchical rotating rigid unit auxetics. *Scientific Reports*, 2017, vol. 7, article number 46529. DOI: [10.1038/srep46529](https://doi.org/10.1038/srep46529).
13. Gatt R., Mizzi L., Azzopardi J.I., Azzopardi K.M., Attard D., Casha A., Briffa J., Grima J.N. Hierarchical Auxetic Mechanical Metamaterials. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, article number 8395. DOI: [10.1038/srep08395](https://doi.org/10.1038/srep08395).
14. Alderson K.L., Alderson A., Grima J.N., Wojciechowski K.W. Auxetic Materials and Related Systems. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 2014, vol. 251, no. 2, pp. 263–266. DOI: [10.1002/pssb.201470114](https://doi.org/10.1002/pssb.201470114).
15. Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S., Volkov M.A. Auxeticity in nano/microtubes produced from orthorhombic crystals. *Smart Materials and Structures*, 2016, vol. 25, no. 5, article number 054006. DOI: [10.1088/0964-1726/25/5/054006](https://doi.org/10.1088/0964-1726/25/5/054006).
16. Zhang J., Jiang D., Scarpa F., Peng H.-X. Enhancement of pullout energy in a single-walled carbon nanotube-polyethylene composite system via auxetic effect. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2013, vol. 55, pp. 188–194. DOI: [10.1016/j.compositesa.2013.09.006](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2013.09.006).
17. Korznikova E.A., Rysaeva L.Kh., Savin A.V., Soboleva E.G., Ekomasov E.G., Ilgamov M.A., Dmitriev S.V. Chain Model for Carbon Nanotube Bundle under Plane Strain Conditions. *Materials*, 2019, vol. 12, no. 23, article number 3951. DOI: [10.3390/ma12233951](https://doi.org/10.3390/ma12233951).
18. Rysaeva L.K., Korznikova E.A., Murzaev R.T., Abdullina D.U., Kudreyko A.A., Baimova J.A., Lisovenko D.S., Dmitriev S.V. Elastic damper based on the carbon nanotube bundle. *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering*, 2020, vol. 18, no. 1, pp. 1–12. DOI: [10.22190/FUME200128011R](https://doi.org/10.22190/FUME200128011R).
19. Abdullina D.U., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Laptev D.V., Kudreyko A.A., Soboleva E.G., Dmitriev S.V., Zhou K. Mechanical Response of Carbon Nanotube Bundle to Lateral Compression. *Computation*, 2020, vol. 8, no. 2, article number 27. DOI: [10.3390/computation8020027](https://doi.org/10.3390/computation8020027).
20. Vasiliev A.A., Dmitriev S.V., Ishibashi Y., Shigenari T. Elastic properties of a two-dimensional model of crystals containing particles with rotational degrees of freedom. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2002, vol. 65, no. 9, pp. 1–7. DOI: [10.1103/PhysRevB.65.094101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.094101).
21. Grima J.N., Alderson A., Evans K.E. Auxetic behaviour from rotating rigid units. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 2005, vol. 242, no. 3, pp. 561–575. DOI: [10.1002/pssb.200460376](https://doi.org/10.1002/pssb.200460376).
22. Tanaka H., Suga K., Iwata N., Shibutani Y. Orthotropic Laminated Open-cell Frameworks Retaining Strong Auxeticity under Large Uniaxial Loading. *Scientific Reports*, 2017, vol. 7, article number 39816. DOI: [10.1038/srep39816](https://doi.org/10.1038/srep39816).
23. Harkati E.H., Bezazi A., Boukharouba W., Scarpa F. Influence of carbon fibre on the through-the-thickness NPR behaviour of composite laminates. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 2009, vol. 246, no. 9, pp. 2111–2117. DOI: [10.1002/pssb.200982043](https://doi.org/10.1002/pssb.200982043).
24. Li B., Li S., Shi K., Zhang X., Yang S., Pan D., Liu L., Nan Y., Zhu X., Song X., Su L., Yang G., Structural properties of single-walled carbon nanotubes under extreme dynamic pressures. *Acta Materialia*, 2022, vol. 228, article number 117776. DOI: [10.1016/j.actamat.2022.117776](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117776).
25. Wittmaack B.K., Volkov A.N., Zhigilei L.V. Phase transformation as the mechanism of mechanical deformation of vertically aligned carbon nanotube arrays: Insights from mesoscopic modeling. *Carbon*, 2019, vol. 143, pp. 587–597. DOI: [10.1016/j.carbon.2018.11.066](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.11.066).
26. Ferreira R.S., Aguiar A.L., Alencar R.S., San-Miguel A., Filho A.G.S. Flat-to-Flat Polymerization of Single-Walled Carbon Nanotubes under High Pressure Mediated by Carbon Chain Encapsulation. *Journal of Physical Chemistry C*, 2021, vol. 125, no. 23, pp. 12857–12869. DOI: [10.1021/acs.jpcc.1c02044](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c02044).
27. Li B., Li S., Shi K., Zhang X., Yang S., Pan D., Liu L., Nan Y., Zhu X., Song X., Su L., Yang G. Structural properties of single-walled carbon nanotubes under extreme dynamic pressures. *Acta Materialia*, 2022, vol. 228, article number 117776. DOI: [10.1016/j.actamat.2022.117776](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117776).

Simulation of mechanical and physical properties of a carbon nanotubes bundle under the transverse compression using a chain model with the reduced number of degrees of freedom

©2022

*Dina U. Abdullina**^{1,4}, Master of Chair of Materials Science and Physics of Metals

Leysan Kh. Galiakhmetova^{2,5}, PhD (Physics and Mathematics), researcher

Yuri V. Bebikhov^{3,6}, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

¹*Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)*

²*Institute for Metals Superplasticity Problems of the RAS, Ufa (Russia)*

³*Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Mirny (Russia)*

*E-mail: dina.abdullina25@gmail.com

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6010-6921>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Received 25.04.2022

Accepted 12.09.2022

Abstract: The paper studies a bundle of oriented carbon nanotubes (CNTs) under the transverse loading under the plane deformation conditions within the framework of a molecular dynamics model with a reduced number of degrees of freedom. The model takes into account CNT wall stretching and bending, as well as van der Waals interactions. Each CNT is represented by a ring of atoms with two degrees of freedom in the plane of the ring. The discrete nature of the model allows describing the large curvature of the CNT wall and the destruction of CNTs at very high pressure. CNT crystal equilibrium structures are obtained under the strain-controlled biaxial loading. Separate CNTs of a sufficiently large diameter have two equilibrium states: with a round and collapsed cross section. Small-diameter CNTs in the free state can only have a circular cross section. The study identified the presence of two phase transitions observed during biaxial compression of a CNT bundle. The first transformation similar to phase transition of the second order leads to ellipticization of CNT cross sections. As a result of the second transition of the first order, bundled CNTs appear in the beam, the proportion of which gradually increases with the increase in compressive strain. The authors calculated beam elasticity constants such as Young's moduli, shear modulus, and Poisson's ratios. The study shows that one of the equilibrium structures (with elliptical CNT cross sections) has the property of a partial auxetic, that is, it has a negative Poisson's ratio under uniaxial loading in a certain direction. The proposed chain model can be effectively applied to analyze physical and mechanical properties of bundles of single-walled or multi-walled CNTs under the plane deformation conditions, and after simple modifications, it can be used to similar structures made of other two-dimensional nanomaterials.

Keywords: auxetic; carbon nanotubes bundle; elastic properties; transverse compression; chain model.

Acknowledgments: The research was carried out under the financial support of the Council for Grants of the President of the Russian Federation for government support of young Russian scientists and under the government support of leading scientific schools of the Russian Federation, grant NSh-4320.2022.1.2.

For citation: Abdullina D.U., Galiakhmetova L.Kh., Bebikhov Yu.V. Simulation of mechanical and physical properties of a carbon nanotubes bundle under the transverse compression using a chain model with the reduced number of degrees of freedom. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 15–22. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-15-22.

Вклад механизмов упрочнения при немонотонном изменении свойств в сплаве Cu–0,6Cr–0,1Zr при кручении под высоким давлением

© 2022

Аксенов Денис Алексеевич^{*1,2,6}, младший научный сотрудник*Фаизова Светлана Никитична*^{3,4}, кандидат физико-математических наук,

доцент кафедры общей и теоретической физики, доцент кафедры водоснабжения и водоотведения

*Фаизов Ильшат Альбертович*⁵, кандидат физико-математических наук, главный специалист¹Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, Уфа (Россия)²Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)³Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, Стерлитамак (Россия)⁴Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа (Россия)⁵ООО «РН-БашНИПИнефть», Уфа (Россия)***E-mail:** aksyonovda@mail.ru⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2652-2646>

Поступила в редакцию 29.04.2022

Принята к публикации 06.09.2022

Аннотация: Фазовые превращения играют важную роль в формировании свойств в дисперсионно-упрочняемых сплавах, таких, например, как сплавы системы Cu–Cr–Zr. Известно, что в условиях интенсивной пластической деформации диффузионные условия существенно меняются, что приводит к изменению кинетики фазовых превращений. В работе изучался сплав Cu–0,6Cr–0,1Zr в состоянии с низкой концентрацией твердого раствора, подверженный кручению под высоким давлением (КВД) (до 10 циклов). При этом за счет низкой концентрации твердого раствора и сформированного ансамбля крупных частиц на первых этапах исключался процесс распада твердого раствора. Предварительная работа по анализу таких структурно-чувствительных характеристик, как электропроводность и параметр решетки, позволила установить немонотонный характер изменения концентрации легирующих элементов в твердом растворе в процессе КВД. Немонотонность связана с существенными изменениями характеристик ансамбля частиц вторых фаз под влиянием высоких напряжений. Столь существенные структурные изменения находят свое отражение в характере изменения механических характеристик. Установлено, что изменения прочности с увеличением числа оборотов КВД имеют также немонотонный характер, который соответствует немонотонному характеру изменения концентрации легирующих элементов и электропроводности. Проведен анализ различных вкладов в упрочнение сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr. Установлено, что основную роль в немонотонном изменении механических характеристик играет вклад дисперсионного упрочнения. Расчетные данные коррелируют с полученными экспериментальными результатами.

Ключевые слова: прочность; медные сплавы; кручение под высоким давлением; электропроводность; фазовые превращения; Cu–0,6Cr–0,1Zr; интенсивная пластическая деформация; равноканальное угловое прессование.

Для цитирования: Аксенов Д.А., Фаизова С.Н., Фаизов И.А. Вклад механизмов упрочнения при немонотонном изменении свойств в сплаве Cu–0,6Cr–0,1Zr при кручении под высоким давлением // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 23–32. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-23-32.

ВВЕДЕНИЕ

Совершенствование структурного состояния металлов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) – актуальная сегодня задача. Измельчение до ультрамелкозернистого и наноструктурного состояния позволяет увеличить прочность некоторых материалов практически в 2 раза [1–3]. Особенно перспективно применение методов ИПД для упрочнения дисперсионно-твердеющих сплавов, таких как медные сплавы системы Cu–Cr–Zr [4]. Предварительная термообработка на твердый раствор сплавов системы Cu–Cr–Zr позволяет дополнительно повысить их прочность за счет постдеформационного старения, в процессе которого происходит распад пересыщенного твердого раствора (ТР) с выделением мелкодисперсных частиц. Наиболее распространенными являются частицы чистого хрома [5; 6] и цирконийсодержащие – Cu₅Zr [7; 8]. Ранее в работах [9–11] было установлено, что в условиях ИПД может происходить деформационно-индуцированное

растворение частиц вторых фаз, которое согласно диаграмме состояния при нормальных условиях можно считать неравновесным процессом. Отдельно необходимо отметить работы [12–14], посвященные установлению динамического равновесия между происходящими процессами фазовых превращений в медных сплавах при деформационной обработке методом кручения под высоким давлением. В частности, было показано, что в медных сплавах с содержанием Ag, Co и Sn в условиях кручения под высоким давлением происходит установление некоторого стационарного значения концентрации легирующего элемента в медной матрице за счет одновременного протекания двух конкурирующих процессов, а именно распада пересыщенного твердого раствора и деформационно-индуцированного растворения частиц вторых фаз. В работах [15; 16] установлено, что деформационно-индуцированное растворение частиц вторых фаз происходит и в дисперсионно-упрочняемом сплаве системы Cu–Cr–Zr в процессе равноканального углового прессования (РКУП) и кручения

под высоким давлением (КВД). Данный процесс для дисперсионно-твердеющих сплавов является значимым, так как напрямую влияет на состояние ТР. Нужно отметить, что ресурс дисперсионного упрочнения материала (Cu–Cr–Zr) в процессе старения зависит от степени пересыщенности ТР.

В работе [17] показано, что активную роль в фазовых превращениях играют условия ИПД, обеспечивая независимый от диффузии механизм, влияющий на состояние второй фазы. В частности, происходит разрушение части вторых фаз и образование острых граней, предрасположенных к растворению. В итоге изменения концентрации ТР могут отклоняться от закономерностей, установленных для таких процессов в условиях, когда изменение размеров частиц происходит только за счет их диффузионного роста или растворения. Соответствующие структурные изменения будут находить свое отражение в изменении механических характеристик сплава системы Cu–Cr–Zr. В данной работе приведены результаты механических испытаний на растяжение и расчетов вкладов в упрочнение низколегированного сплава системы Cu–Cr–Zr, подверженного КВД в предварительно состаренном состоянии.

Цель исследования – установить влияние фазовых превращений в ходе КВД сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr в состаренном состоянии на изменения прочности и соотношение вкладов в упрочнение.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве материала исследования был выбран сплав системы Cu–Cr–Zr в состоянии поставки, с содержанием Cr и Zr 0,6 и 0,1 вес. % соответственно. Выбор весового содержания хрома и циркония в сплаве Cu–0,6Cr–0,1Zr обусловлен тем, что данные значения близки к пределу растворимости данных элементов в медной матрице. Это позволит более четко проследить вклад дисперсионного упрочнения в итоговую прочность сплава. Выбранный сплав является наиболее распространенным в производстве прутков марки БрХЦр. В качестве исходного было принято состояние сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr после промышленной обработки (состояние проката) и длительного 4-часового старения при температуре 450 °С. В результате данной обработки было сформировано состояние с предельно низкой концентрацией твердого раствора и ансамблем крупных частиц со средним размером $0,7 \pm 0,1$ мкм. Средний размер зерна составлял 47 ± 2 мкм.

Образцы диаметром 10 мм и толщиной 2 мм деформировали методом кручения под высоким давлением при комнатной температуре со скоростью 1 оборот в минуту под давлением 6 ГПа. Количество оборотов составило от 1 до 10 с шагом 1.

В процессе деформации кручением в образце формируется крайне неоднородная структура. Степень накопленной сдвиговой деформации увеличивается от центра к краю. В связи с этим исследования структурных и механических характеристик проводились в области $R/2$ (середина радиуса образца). Рентгеноструктурный анализ (РСА) проводился на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE с использованием Cu-K α 1 излучения, сгенерированного при напряжении 40 кВ и силе тока 40 мА.

Микроструктурные исследования, анализ размера зерен/субзерен проводились на просвечивающем электронном микроскопе Jeol JEM-2100 при ускоряющем напряжении 200 кВ в светлом и темном поле. Для количественного и качественного анализа частиц вторых фаз применялась методика угольных экстракционных реплик.

Электропроводность измеряли вихретоковым методом при помощи прибора ВЭ-27НЦ с погрешностью 0,5 МСм/м.

Механические испытания проводили на малых плоских образцах при помощи разрывной машины АУСМИМО при комнатной температуре со скоростью 1 мм/мин. Образцы вырезались таким образом, чтобы рабочая база 3,5 мм соответствовала области $R/2$ исходной заготовки.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В процессе КВД сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr в исходном состоянии наблюдалось нетипичное изменение электропроводности и параметра решетки (рис. 1 [17, с. 220]). Характер изменения данных параметров для медных сплавов отражает соответствующие структурные изменения.

Уменьшение электропроводности и увеличение параметра решетки на 6-м обороте свидетельствуют об увеличении концентрации твердого раствора. Используя систему уравнений с коэффициентами пропорциональности для Cr и Zr, получили зависимости изменения концентрации твердого раствора для легирующих элементов (рис. 2 [Привод. по: 17, с. 220]) в процессе КВД:

$$\begin{cases} \rho - \rho_0 = A_1 C_{Cr} + A_2 C_{Zr} \\ a - a_0 = B_1 C_{Cr} + B_2 C_{Zr} \end{cases},$$

где ρ , a – электросопротивление и параметр решетки исследуемого сплава соответственно;

ρ_0 , a_0 – электросопротивление и параметр решетки чистой меди соответственно;

C_{Cr} , C_{Zr} – концентрации твердого раствора Cr и Zr соответственно;

A_1 , A_2 , B_1 , B_2 – коэффициенты пропорциональности (таблица 1).

Возрастание удельного сопротивления чистой меди при холодном деформировании прекращается на уровне $0,4 \text{ n}\Omega\text{m}$ при накопленной степени деформации $0,7 \div 0,8^1$, поэтому вклад в изменение электросопротивления от холодной деформации находится в рамках погрешности и в расчете данный параметр не учитывается.

В работе [17] было установлено, что активную роль в ускорении процесса деформационно-индуцированного растворения частиц, ведущего к немономонному изменению концентрации ТР, играют условия, возникающие в процессе КВД. Одной из причин наблюдаемого характера изменений является процесс разлома и последующего деформационно-индуцированного

¹ Simon N.J., Drexler E.S., Reed R.P. NIST monograph 177. Properties of Copper and Copper Alloys at Cryogenic Temperatures. Washington: U.S. Government printing office. 1992. 200 p.

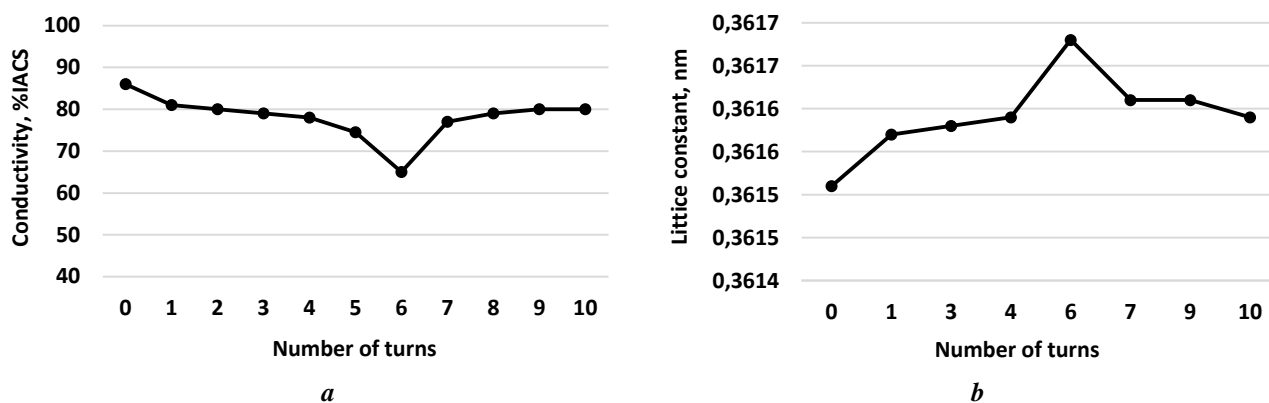


Рис. 1. Графики изменения электропроводности (а) и параметра решетки (б) сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr в процессе кручения под высоким давлением [Привод. по: 17, с. 220]
Fig. 1. Graphs of changes in the electrical conductivity (a) and lattice parameter (b) of the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy during high pressure torsion [Reproduced from: 17, p. 220]

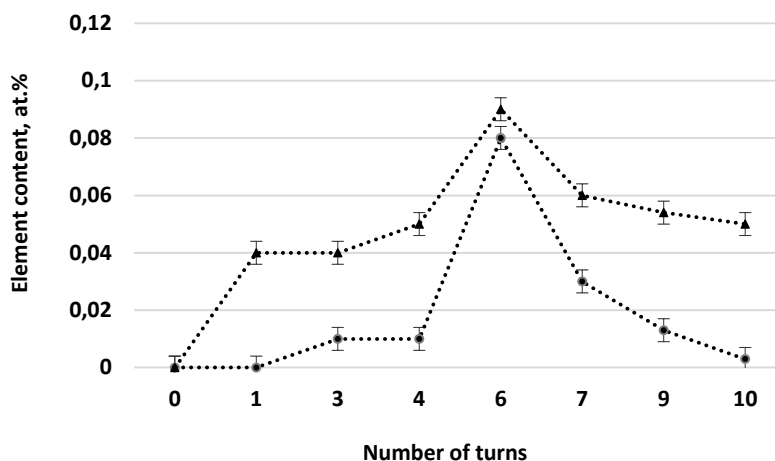


Рис. 2. График изменения концентрации растворенных элементов сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr в процессе кручения под высоким давлением [Привод. по: 17, с. 220]
Fig. 2. Graph of change of concentration of the dissolved elements of the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy during high pressure torsion [Reproduced from: 17, p. 220]

Таблица 1. Значения коэффициентов пропорциональности
Table 1. Values of proportionality coefficients

Коэффициент	Значение	Коэффициент	Значение
A_1^2	$3,9 \cdot 10^{-8}$ Ом·м/ат. %	B_1^3	0,00031 нм/ат. %
A_2^4	$0,34 \cdot 10^{-8}$ Ом·м/ат. %	B_2^5	0,0016 нм/ат. %

² Simon N.J., Drexler E.S., Reed R.P. *Properties of Copper and Copper Alloys at Cryogenic Temperatures*. Washington: U.S. Government printing office, 1992. 200 p.

³ Chakrabarti D.J., Laughlin D.E. *The Cr-Cu (Chromium-Copper) system* // *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*. 1984. Vol. 5. P. 59–68.

⁴ Toyoda T. *The Effect of 4d Transition Metal Impurities on the Residual Resistivity of Au or Cu* // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1975. Vol. 39. № 1. P. 76–83.

⁵ Arnberg L., Backmark U., Bäckström N., Lange J. *A new high strength, high conductivity Cu-0.5wt.%Zr alloy produced by rapid solidification technology* // *Materials Science and Engineering*. 1986. Vol. 83. № 1. P. 115–121.

растворения исходного ансамбля частиц вторых фаз по механизму Гиббса – Томпсона.

В низколегированных медных сплавах, в частности в сплаве Cu–0,6Cr–0,1Zr, характеристики ансамбля частиц вторых фаз и состояние ТР играют значительную роль в формировании прочности. Как видно из рис. 3, изменения предела прочности коррелируют с графиками изменения электропроводности, параметра решетки и концентрации легирующих элементов в твердом растворе.

На рис. 4 представлено изображение микроструктуры сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr после 4, 6 и 7 оборотов КВД. Наблюдается сильное измельчение. Средний размер зерен/субзерен (таблица 2) определялся при помощи светлого и темного поля.

При помощи ПЭМ и методики угольных экстракционных реплик (рис. 5) был проведен количественный анализ частиц вторых фаз. Средний размер (D) и расстояние между частицами (l) представлены в таблице 2.

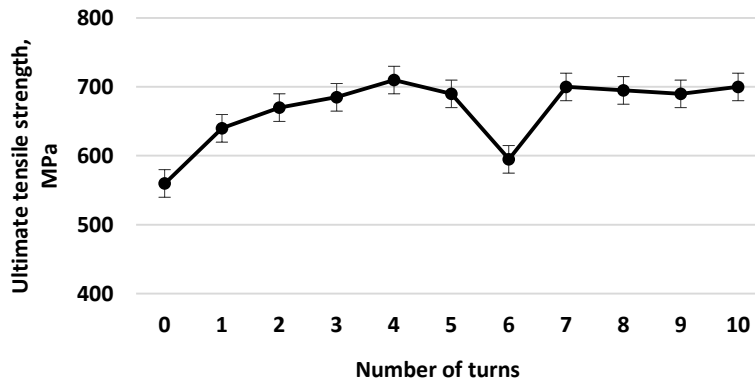


Рис. 3. График изменения предела прочности сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr в процессе кручения под высоким давлением
 Fig. 3. Graph of change in tensile strength of the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy during high pressure torsion

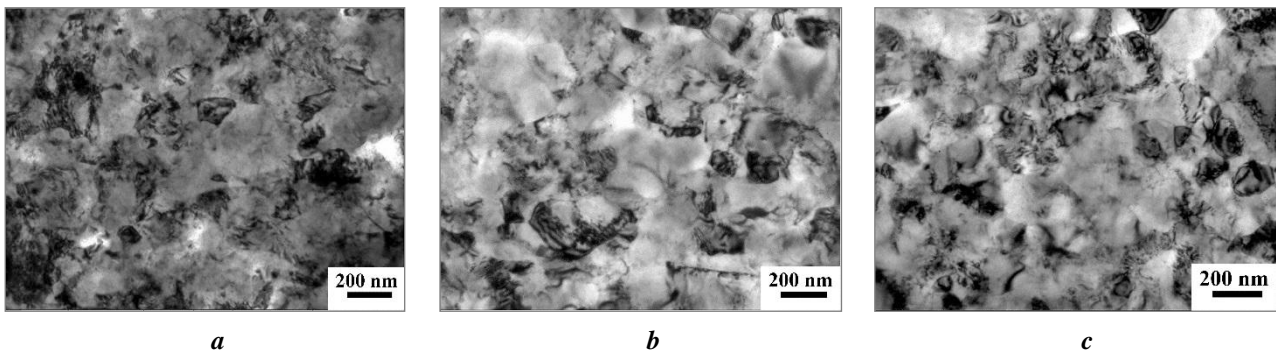


Рис. 4. Изображение микроструктуры сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr полученной при помощи просвечивающей электронной микроскопии после 4 (a), 6 (b) и 7 (c) оборотов кручения под высоким давлением
 Fig. 4. Image of the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy microstructure produced by transmission electron microscopy after 4 (a), 6 (b), and 7 (c) high pressure torsion revolutions

Таблица 2. Переменные параметры, полученные в ходе эксперимента
 Table 2. Variable parameters obtained during the experiment

Параметр	4 оборота КВД	6 оборотов КВД	7 оборотов КВД
$\rho_d, 10^{14} \text{ м}^{-2}$	9,05	12,85	11,35
$d, 10^{-9} \text{ м}$	130	120	90
$l, 10^{-9} \text{ м}$	95	285	66
$D, 10^{-9} \text{ м}$	10	22	10

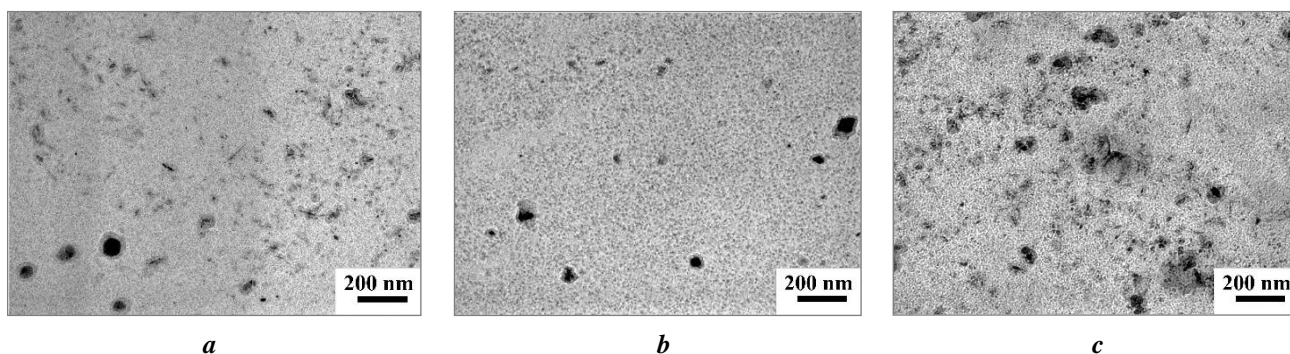


Рис. 5. Изображение экстракционных реплик (просвечивающая электронная микроскопия, светлое поле), полученных со сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr после 4 (а), 6 (b) и 7 (с) оборотов кручения под высоким давлением
Fig. 5. Image of extraction replicas (transmission electron microscopy, bright field) obtained from the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy after 4 (a), 6 (b), and 7 (c) high pressure torsion revolutions

После 6 оборотов КВД наблюдается существенное увеличение расстояния между частицами, т. е. уменьшаются их плотности за счет деформационно-индуцированного растворения, о чем свидетельствуют данные параметра решетки и электропроводности. После 7 оборотов расстояние между частицами вновь уменьшается, что можно связать с процессом деформационно-стимулированного распада твердого раствора.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Наблюдаемые изменения размера зерен/субзерен (d) и плотности дислокаций (ρ_d), рассчитанной при помощи РСА (таблица 2), не могут привести к столь существенному изменению предела прочности. Минимум предела прочности на 6-м обороте соответствует максимальной концентрации Cr и Zr в твердом растворе (рис. 2), что косвенно свидетельствует о снижении вклада дисперсионного упрочнения в общий предел текучести материала.

Предел текучести материала в первом приближении можно представить как аддитивную величину согласно Оровану⁶:

$$\sigma_{0,2} = \sigma_0 + \Delta\sigma_{\text{тр}} + \Delta\sigma_{\text{дл}} + \Delta\sigma_{\text{д}} + \Delta\sigma_{\text{з}},$$

где σ_0 – напряжение трения решетки ГЦК (для меди $\sigma_0=6$ МПа);

$\Delta\sigma_{\text{тр}}$ – вклад твердорастворного упрочнения;

$\Delta\sigma_{\text{дл}}$ – вклад дисперсионного упрочнения;

$\Delta\sigma_{\text{д}}$ – вклад дислокационного упрочнения;

$\Delta\sigma_{\text{з}}$ – вклад зернограничного упрочнения.

Твердорастворное упрочнение рассчитывали по формуле⁷

$$\Delta\sigma_{\text{тр}} = 2,5G\delta_L^{\frac{3}{2}}C_L, \quad (1)$$

где G – модуль сдвига матрицы;

⁶ Orowan E. *Dislocations in Metals*. New York: AIME, 1954. 200 p.

⁷ Шашков Д.П. *Дислокационный механизм упрочнения*. М.: Литературный фонд РФ, 1995. 60 с.

δ_L – параметр размерного несоответствия:

$$\delta = \frac{r_L - r_M}{r_M},$$

где r_L – атомный радиус растворенного элемента;

r_M – атомный радиус матричного металла;

C_L – атомная концентрация легирующего элемента.

Вклад от дисперсионного упрочнения определяли по формуле Орована⁸:

$$\Delta\sigma_{\text{дл}} = 0,85 \frac{Gb}{1-D}, \quad (2)$$

где b – вектор Бюргерса;

l – среднее расстояние между центрами частиц;

D – средний размер частиц.

Вклад от дислокационного упрочнения [18]:

$$\Delta\sigma_{\text{д}} = \sigma_0 + \alpha m G b \sqrt{\rho_d}, \quad (3)$$

где α – параметр междислокационного взаимодействия;

m – ориентационный коэффициент;

ρ_d – плотность дислокаций.

В условиях ИПД при степенях $e \gg 1$ формируется высокая доля большеугловых границ зерен [19; 20]. Тогда вклад зернограничного упрочнения можно задать уравнением Холла – Петча [20]:

$$\Delta\sigma_{\text{з}} = kd^{-\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

где d – средний размер зерна;

k – коэффициент упрочнения, характеризующий материал, а также состояние границ⁹.

⁸ Коган Я.Д. *Расчет упрочнения металлов дисперсными нитридами по механизму Мотта-Иаббаро и Орована // Повышение надежности и долговечности машин и инструмента методами химико-термической обработки*. М.: МАДИ, 1981. С. 12–21.

⁹ Мак-Лин Д. *Механические свойства металлов*. М.: Металлургия, 1965. 431 с.

Вклад каждого параметра в упрочнение рассчитывался по формулам (1)–(4). В таблице 3 приведены общепринятые параметры и константы для меди и медных сплавов.

Анализ полученных результатов (таблица 4) показывает, что в случае 4 оборотов КВД одним из основных вкладов в упрочнение является вклад от дисперсионно-упрочняющих частиц. Увеличение количества мелкодисперсных частиц связано с механическим разломом частиц исходного ансамбля. Вклад от твердорастворного упрочнения минимальный. При 6 оборотах КВД происходит снижение вклада дисперсионного упрочнения. При этом наблюдается увеличение вклада от твердого раствора. Это связано с активным развитием процесса деформационно-индуцированного растворения частиц, который индуцирован образованием острых граней, образовавшихся на предыдущих этапах механического разлома частиц. Размер фрагментов, согласно экспериментальным данным, не изменяется, поэтому вклад зернограницного упрочнения не меняется, но при этом становится наибольшим среди других вкладов. В процессе последующей деформации (7 оборотов) происходит процесс деформационно-стимулированного распада пересыщенного раствора. Он приводит к увеличению доли и величины вклада дисперсионного упрочнения до

максимального в данном исследовании значения и, как видно из таблицы 3, – к достижению максимального суммарного упрочнения сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr.

Рис. 6 свидетельствует о том, что вклады от границ зерен, плотности дислокаций и трения решетки в упрочнение сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr в процессе увеличения количества оборотов с 4 до 7 практически не изменяются, основную роль в изменении прочностных характеристик играют механизмы дисперсионного и твердорастворного упрочнения. Таким образом, наблюдается динамика изменения предела текучести, полученного путем расчета и эксперимента.

Как отмечено Дж. Мартином¹⁰, разница между расчетными и экспериментальными данными может быть связана с тем, что теория предсказывает линейное упрочнение, тогда как эксперимент показывает, что с увеличением степени деформации происходит непрерывное падение скорости упрочнения. Таким образом, с увеличением степени деформации при упрочняющем действии дисперсных частиц разница между экспериментальными и расчетными значениями будет увеличиваться. Стоит отметить, что значения разницы для 4 и 6 оборотов между рассчитанными (160 МПа) и экспериментальными (145 МПа) значениями предела текучести коррелируют.

Таблица 3. Параметры для расчетов вкладов в упрочнение
Table 3. Parameters for calculating contributions to hardening

Параметр	Значение	Параметр	Значение	Параметр	Значение
σ_0	6 МПа	ν	0,37	r_{Cu}	$128 \cdot 10^{-12}$ м
G	$42,1 \cdot 10^3$ МПа	α	0,15	r_{Cr}	$130 \cdot 10^{-12}$ м
C_{Cr}	0,890 % ат.	m	3,1	r_{Zr}	$139 \cdot 10^{-12}$ м
C_{Zr}	0,105 % ат.	b	$2,56 \cdot 10^{-10}$ м	k_3	200 МПа/мкм

Таблица 4. Вклады механизмов упрочнения
Table 4. Contributions of hardening mechanisms

Вид обработки	Вклад механизмов упрочнения, МПа/%					Рассчитанный условный предел текучести, МПа/%	Экспериментальный условный предел текучести, МПа
	σ_0	$\Delta\sigma_d$	$\Delta\sigma_z$	$\Delta\sigma_{тр}$	$\Delta\sigma_{ду}$		
4 оборота КВД	6/1	156/20	277/35	0,7/>1	350/44	790/100	710±18
6 оборотов КВД	6/1	185/29	289/46	35/6	132/21	629/100	565±20
7 оборотов КВД	6/1	174/18	289/30	0,8/>1	489/51	959/100	700±20

¹⁰ Мартин Дж. Микромеханизмы дисперсионного твердения сплавов. М.: Металлургия, 1983. 167 с.

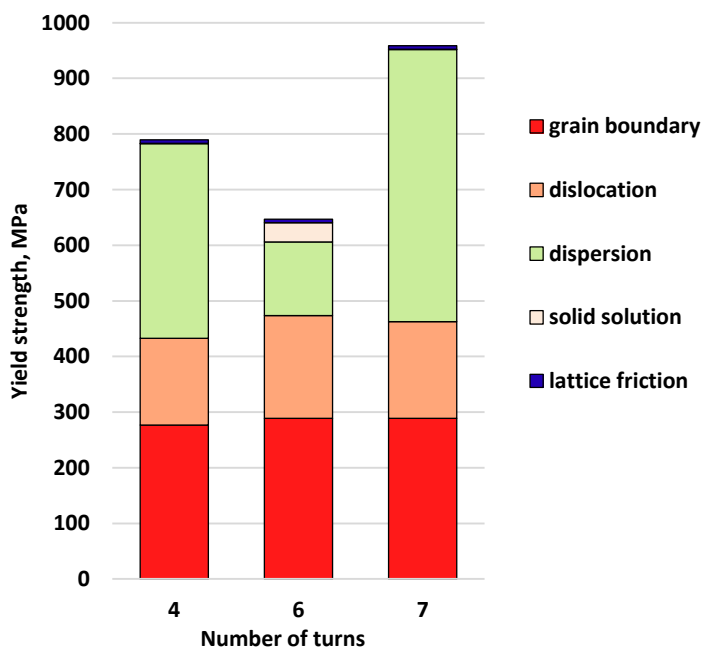


Рис. 6. Гистограмма вкладов механизмов упрочнения сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr после кручения под высоким давлением
 Fig. 6. Histogram of contributions of the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy hardening mechanisms after high pressure torsion

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Установлено, что в условиях КВД сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr в состоянии с предельно низкой концентрацией ТР происходит немономонное изменение концентрации легирующих элементов и прочностных характеристик. Это связано с условиями КВД, при которых происходит разлом частиц и изменяется их термодинамическое состояние с образованием острых граней, что приводит к индуцированию процесса растворения частиц.

2. Значения предела текучести, полученные путем расчета, демонстрируют ту же динамику изменения, что и экспериментальные данные. На 6-м обороте происходит активное деформационно-индуцированное растворение частиц вторых фаз и наблюдается снижение предела текучести на прочности ~145 МПа.

3. Показано, что основными вкладами в прочность сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr в процессе КВД являются дислокационное, зернограничное и дисперсионное упрочнения. На немономонный характер изменения прочности в процессе КВД сплава Cu–0,6Cr–0,1Zr основное влияние оказывает вклад дисперсионного упрочнения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Y., Blank V.D., Botta W.J., Bryła K., Čížek J., Divinski S.V., Enikeev N., Estrin Yu., Faraji G., Figueiredo R.B., Fuji M., Furuta T., Thierry G., Gubicza J., Hohenwarter A., Leoben M., Horita Z., Huot J., Iкома Y., Janeček M., Kawasaki M., Král P., Kuramoto Sh., Langdon T.G., Leiva D., Levitas V.I., Mazilkin A., Mito M., Miyamoto H., Nishizaki T., Pippin R., Popov V., Popova E.N., Purcek G., Renk O., Révész A., Sauvage X., Sklenička V., Skrotzki W., Straumal B.B., Suwas S., Toth L.S., Tsuji N., Valiev R.Z., Wilde G., Zehetbauer M.J., Zhu X. Nanomaterials by Severe Plastic Deformation: Review of Historical Developments and Recent Advances // *Materials Research Letters*. 2022. Vol. 10. № 4. P. 163–256. DOI: [10.1080/21663831.2022.2029779](https://doi.org/10.1080/21663831.2022.2029779).
- Faraji G., Kim H.S., Kashi H.T. Chapter 7. Mechanical Properties of Ultrafine-Grained and Nanostructured Metals // *Severe Plastic Deformation*. Niderlandy: Elsevier, 2018. P. 223–257. DOI: [10.1016/b978-0-12-813518-1.00007-2](https://doi.org/10.1016/b978-0-12-813518-1.00007-2).
- Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Using high-pressure torsion for metal processing: Fundamentals and applications // *Progress in Materials Science*. 2008. Vol. 53. № 6. P. 893–979. DOI: [10.1016/j.pmatsci.2008.03.002](https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2008.03.002).
- Sousa T.G., Moura I.A. de B., Garcia Filho F.D.C., Monteiro S.N., Brandão L. P. Combining severe plastic deformation and precipitation to enhance mechanical strength and electrical conductivity of Cu–0.65Cr–0.08Zr alloy // *Journal of Materials Research and Technology*. 2020. Vol. 9. № 3. P. 5953–5961. DOI: [10.1016/j.jmrt.2020.03.124](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.03.124).
- Peng L., Xie H., Huang G., Xu G., Yin X., Feng X., Mi X., Yang Z. The phase transformation and strengthening of a Cu-0.71 wt% Cr alloy // *Journal of Alloys and Compounds*. 2017. Vol. 708. P. 1096–1102. DOI: [10.1016/j.jallcom.2017.03.069](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.03.069).
- Bodyakova A., Mishnev R., Belyakov A., Kaibyshev R. Effect of chromium content on precipitation in Cu–Cr–Zr alloys // *Journal of Materials Science*. 2022. Vol. 57. № 27. P. 13043–13059. DOI: [10.1007/s10853-022-07454-8](https://doi.org/10.1007/s10853-022-07454-8).
- Khomskaya I.V., Zel'dovich V.I., Frolova N.Yu., Abdullina D.N., Kheifets A.E. Investigation of Cu₅Zr particles precipitation in Cu-Zr and Cu-Cr-Zr alloys subjected to quenching and high strain rate deformation //

- Letters on Materials. 2019. Vol. 9. № 4. P. 400–404. DOI: [10.22226/2410-3535-2019-4-400-404](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2019-4-400-404).
8. Chen X., Jiang F., Liu L., Huang H., Shi Z. Structure and orientation relationship of new precipitates in a Cu–Cr–Zr alloy // *Materials Science and Technology (United Kingdom)*. 2017. Vol. 34. № 3. P. 282–288. DOI: [10.1080/02670836.2017.1376428](https://doi.org/10.1080/02670836.2017.1376428).
 9. Ivanisenko Y., Lojkowski W., Valiev R.Z., Fecht H.-J. The mechanism of formation of nanostructure and dissolution of cementite in a pearlitic steel during high pressure torsion // *Acta Materialia*. 2003. Vol. 51. № 18. P. 5555–5570. DOI: [10.1016/s1359-6454\(03\)00419-1](https://doi.org/10.1016/s1359-6454(03)00419-1).
 10. Guelton N., François M. Strain-Induced Dissolution of Cementite in Cold-Drawn Pearlitic Steel Wires // *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*. 2020. Vol. 51. № 4. P. 1602–1613. DOI: [10.1007/s11661-020-05640-4](https://doi.org/10.1007/s11661-020-05640-4).
 11. Chen H., Ji Y., Zhang C., Liu W., Chen H., Yang Z., Chen L.-Q., Chen L. Understanding cementite dissolution in pearlitic steels subjected to rolling-sliding contact loading: A combined experimental and theoretical study // *Acta Materialia*. 2017. Vol. 141. P. 193–205. DOI: [10.1016/j.actamat.2017.09.017](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.09.017).
 12. Straumal B.B., Kilmametov A.R., Korneva A., Mazilkin A.A., Straumal P.B., Zieba P., Baretzky B. Phase transitions in Cu-based alloys under high pressure torsion // *Journal of Alloys and Compounds*. 2017. Vol. 707. P. 20–26. DOI: [10.1016/j.jallcom.2016.12.057](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.12.057).
 13. Straumal B.B., Pontikis V., Kilmametov A.R., Mazilkin A.A., Dobatkin S.V., Baretzky B. Competition between precipitation and dissolution in Cu–Ag alloys under high pressure torsion // *Acta Materialia*. 2017. Vol. 122. P. 60–71. DOI: [10.1016/j.actamat.2016.09.024](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.024).
 14. Straumal B.B., Kilmametova A.R., Baretzky B., Kogtenkova O.A., Straumal P.B., Litynska-Dobrzynska L., Chulist R., Korneva A., Zieba P. High pressure torsion of Cu–Ag and Cu–Sn alloys: Limits for solubility and dissolution // *Acta Materialia*. 2020. Vol. 195. P. 184–198. DOI: [10.1016/j.actamat.2020.05.055](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.05.055).
 15. Фаизов И.А., Мулюков Р.Р., Аксенов Д.А., Фаизова С.Н., Землякова Н.В., Cardoso K.R., Zeng Y. Растворение частиц вторых фаз в низколегированном медном сплаве системы Cu–Cr–Zr при обработке методом равноканального углового прессования // *Письма о материалах*. 2018. Т. 8. № 1. С. 110–114. DOI: [10.22226/2410-3535-2018-1-110-114](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2018-1-110-114).
 16. Фаизова С.Н., Рааб Г.И., Зарипов Н.Г., Аксенов Д.А., Фаизов И.А. Физические аспекты формирования высокопрочного состояния дисперсионно-упрочняемых сплавов при интенсивной пластической деформации кручением // *Физическая мезомеханика*. 2015. Т. 18. № 4. С. 87–93. EDN: [UGCJQV](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2015-4-87-93).
 17. Faizova S.N., Aksenov D.A., Faizov I.A., Nazarov K.S. Unusual kinetics of strain-induced diffusional phase transformations in Cu–Cr–Zr alloy // *Letters on Materials*. 2021. Vol. 11. № 2. P. 218–222. DOI: [10.22226/2410-3535-2021-2-218-222](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-2-218-222).
 18. Zhao Y.H., Bingert J.F., Zhu Y.T., Liao X.Z., Valiev R.Z., Horita Z., Langdon T.G., Zhou Y.Z., Lavernia E.J. Tougher ultrafine grain Cu via high-angle grain boundaries and low dislocation density // *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 92. № 8. Article number 081903. DOI: [10.1063/1.2870014](https://doi.org/10.1063/1.2870014).
 19. Morozova A., Borodin E., Bratov V., Zhrebtsov S., Belyakov A., Kaibyshev R. Grain Refinement Kinetics in a Low Alloyed Cu–Cr–Zr Alloy Subjected to Large Strain Deformation // *Materials*. 2017. Vol. 10. № 12. Article number 1394. DOI: [10.3390/ma10121394](https://doi.org/10.3390/ma10121394).
 20. Приходько В.М., Петрова Л.Г., Чудина О.В. Металлофизические основы разработки упрочняющих технологий. М.: Машиностроение, 2003. 384 с.

REFERENCES

1. Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Y., Blank V.D., Botta W.J., Bryła K., Čížek J., Divinski S.V., Enikeev N., Estrin Yu., Faraji G., Figueiredo R.B., Fuji M., Furuta T., Thierry G., Gubicza J., Hohenwarter A., Leoben M., Horita Z., Huot J., Ikoma Y., Janeček M., Kawasaki M., Král P., Kuramoto Sh., Langdon T.G., Leiva D., Levitas V.I., Mazilkin A., Mito M., Miyamoto H., Nishizaki T., Pippan R., Popov V., Popova E.N., Purcek G., Renk O., Révész A., Sauvage X., Sklenička V., Skrotzki W., Straumal B.B., Suwas S., Toth L.S., Tsuji N., Valiev R.Z., Wilde G., Zehetbauer M.J., Zhu X. Nanomaterials by Severe Plastic Deformation: Review of Historical Developments and Recent Advances. *Materials Research Letters*, 2022, vol. 10, no. 4, pp. 163–256. DOI: [10.1080/21663831.2022.2029779](https://doi.org/10.1080/21663831.2022.2029779).
2. Faraji G., Kim H.S., Kashi H.T. Chapter 7. Mechanical Properties of Ultrafine-Grained and Nanostructured Metals. *Severe Plastic Deformation*. Niderlandy, Elsevier Publ., 2018, pp. 223–257. DOI: [10.1016/b978-0-12-813518-1.00007-2](https://doi.org/10.1016/b978-0-12-813518-1.00007-2).
3. Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Using high-pressure torsion for metal processing: Fundamentals and applications. *Progress in Materials Science*, 2008, vol. 53, no. 6, pp. 893–979. DOI: [10.1016/j.pmatsci.2008.03.002](https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2008.03.002).
4. Sousa T.G., Moura I.A. de B., Garcia Filho F.D.C., Monteiro S.N., Brandão L. P. Combining severe plastic deformation and precipitation to enhance mechanical strength and electrical conductivity of Cu–0.65Cr–0.08Zr alloy. *Journal of Materials Research and Technology*, 2020, vol. 9, no. 3, pp. 5953–5961. DOI: [10.1016/j.jmrt.2020.03.124](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.03.124).
5. Peng L., Xie H., Huang G., Xu G., Yin X., Feng X., Mi X., Yang Z. The phase transformation and strengthening of a Cu–0.71 wt% Cr alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, 2017, vol. 708, pp. 1096–1102. DOI: [10.1016/j.jallcom.2017.03.069](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.03.069).
6. Bodyakova A., Mishnev R., Belyakov A., Kaibyshev R. Effect of chromium content on precipitation in Cu–Cr–Zr alloys. *Journal of Materials Science*, 2022, vol. 57, no. 27, pp. 13043–13059. DOI: [10.1007/s10853-022-07454-8](https://doi.org/10.1007/s10853-022-07454-8).
7. Khomskaya I.V., Zel'dovich V.I., Frolova N.Yu., Abdullina D.N., Kheifets A.E. Investigation of Cu₅Zr particles precipitation in Cu–Zr and Cu–Cr–Zr alloys subjected to quenching and high strain rate deformation. *Letters on Materials*, 2019, vol. 9, no. 4, pp. 400–404. DOI: [10.22226/2410-3535-2019-4-400-404](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2019-4-400-404).
8. Chen X., Jiang F., Liu L., Huang H., Shi Z. Structure and orientation relationship of new precipitates in a Cu–Cr–Zr alloy. *Materials Science and Technology (United Kingdom)*. 2017. Vol. 34. № 3. P. 282–288. DOI: [10.1080/02670836.2017.1376428](https://doi.org/10.1080/02670836.2017.1376428).

- Kingdom), 2017, vol. 34, no. 3, pp. 282–288. DOI: [10.1080/02670836.2017.1376428](https://doi.org/10.1080/02670836.2017.1376428).
9. Ivanisenko Y., Lojkowski W., Valiev R.Z., Fecht H.-J. The mechanism of formation of nanostructure and dissolution of cementite in a pearlitic steel during high pressure torsion. *Acta Materialia*, 2003, vol. 51, no. 18, pp. 5555–5570. DOI: [10.1016/s1359-6454\(03\)00419-1](https://doi.org/10.1016/s1359-6454(03)00419-1).
 10. Guelton N., François M. Strain-Induced Dissolution of Cementite in Cold-Drawn Pearlitic Steel Wires. *Metalurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, 2020, vol. 51, no. 4, pp. 1602–1613. DOI: [10.1007/s11661-020-05640-4](https://doi.org/10.1007/s11661-020-05640-4).
 11. Chen H., Ji Y., Zhang C., Liu W., Chen H., Yang Z., Chen L.-Q., Chen L. Understanding cementite dissolution in pearlitic steels subjected to rolling-sliding contact loading: A combined experimental and theoretical study. *Acta Materialia*, 2017, vol. 141, pp. 193–205. DOI: [10.1016/j.actamat.2017.09.017](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.09.017).
 12. Straumal B.B., Kilmametov A.R., Korneva A., Mazilkin A.A., Straumal P.B., Zieba P., Baretzky B. Phase transitions in Cu-based alloys under high pressure torsion. *Journal of Alloys and Compounds*, 2017, vol. 707, pp. 20–26. DOI: [10.1016/j.jallcom.2016.12.057](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.12.057).
 13. Straumal B.B., Pontikis V., Kilmametov A.R., Mazilkin A.A., Dobatkin S.V., Baretzky B. Competition between precipitation and dissolution in Cu-Ag alloys under high pressure torsion. *Acta Materialia*, 2017, vol. 122, pp. 60–71. DOI: [10.1016/j.actamat.2016.09.024](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.024).
 14. Straumal B.B., Kilmametova A.R., Baretzky B., Kogtenkova O.A., Straumal P.B., Litynska-Dobrzynska L., Chulist R., Korneva A., Zieba P. High pressure torsion of Cu-Ag and Cu-Sn alloys: Limits for solubility and dissolution. *Acta Materialia*, 2020, vol. 195, pp. 184–198. DOI: [10.1016/j.actamat.2020.05.055](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.05.055).
 15. Faizov I.A., Mulyukov R.R., Aksekov D.A., Faizova S.N., Zemlyakova N.V., Cardoso K.R., Zeng Y. Dissolution of the second phase particles in the course of the equal channel angular pressing of diluted Cu-Cr-Zr alloy. *Pisma o materialakh*, 2018, vol. 8, no. 1, pp. 110–114. DOI: [10.22226/2410-3535-2018-1-110-114](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2018-1-110-114).
 16. Faizova S.N., Raab G.I., Zaripov N.G., Aksekov D.A., Faizov I.A. Physical aspects of high-strength state formation in particle reinforced alloys under high pressure torsion. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 2015, vol. 18, no. 4, pp. 87–93. EDN: [UGCJQV](https://www.edn.ru/UGCJQV).
 17. Faizova S.N., Aksekov D.A., Faizov I.A., Nazarov K.S. Unusual kinetics of strain-induced diffusional phase transformations in Cu-Cr-Zr alloy. *Letters on Materials*, 2021, vol. 11, no. 2, pp. 218–222. DOI: [10.22226/2410-3535-2021-2-218-222](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-2-218-222).
 18. Zhao Y.H., Bingert J.F., Zhu Y.T., Liao X.Z., Valiev R.Z., Horita Z., Langdon T.G., Zhou Y.Z., Lavernia E.J. Tougher ultrafine grain Cu via high-angle grain boundaries and low dislocation density. *Applied Physics Letters*, 2008, vol. 92, no. 8, article number 081903. DOI: [10.1063/1.2870014](https://doi.org/10.1063/1.2870014).
 19. Morozova A., Borodin E., Bratov V., Zhrebtsov S., Belyakov A., Kaibyshev R. Grain Refinement Kinetics in a Low Alloyed Cu-Cr-Zr Alloy Subjected to Large Strain Deformation. *Materials*, 2017, vol. 10, no. 12, article number 1394. DOI: [10.3390/ma10121394](https://doi.org/10.3390/ma10121394).
 20. Prikhodko V.M., Petrova L.G., Chudina O.V. *Metallofizicheskie osnovy razrabotki uprochnyayushchikh tekhnologiy* [Metallophysical basis for the development of hardening technology]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 2003. 384 p.

Hardening mechanisms contribution at nonmonotonic change of properties in the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy at high pressure torsion

© 2022

Denis A. Aksekov^{*1,2,6}, junior researcherSvetlana N. Faizova^{3,4}, PhD (Physics and Mathematics), assistant professor of Chair of General and Theoretical Physics, assistant professor of Chair of Water Supply and DisposalIlshat A. Faizov⁵, PhD (Physics and Mathematics), chief specialist¹*Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa (Russia)*²*Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)*³*Sterlitamak branch of Bashkir State University, Sterlitamak (Russia)*⁴*Ufa State Petroleum Technological University, Ufa (Russia)*⁵*RN-BashNIPIneft LLC, Ufa (Russia)**E-mail: aksyonovda@mail.ru⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2652-2646>

Received 29.04.2022

Accepted 06.09.2022

Abstract: Phase transformations play an important role in the formation of properties in the dispersion-hardened alloys, for example, such as the Cu–Cr–Zr system alloys. It is known that under severe plastic deformation, the diffusion conditions change significantly, which leads to a change in the phase transformation kinetics. In this work, the authors studied the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy in the low concentration solid solution state subjected to high pressure torsion (up to 10 cycles). In this case, due to the solid solution low concentration and the formed ensemble of large particles, the process of solid solution decomposition was excluded at the first stages. The preliminary work on the analysis of such structurally sensitive characteristics as electrical conductivity and lattice parameter made it possible to identify the nonmonotonic nature of a change in the alloying elements concentration in the solid solution during HPT. Nonmonotonicity is related to the significant changes in the characteristics of the second phase particles ensemble under the influence of high voltages. Such sig-

nificant structural changes are reflected in the nature of the mechanical characteristics change. The authors identified that when increasing the number of HPT revolutions, changes in strength also have a nonmonotonic nature, which corresponds to the nonmonotonic nature of changes in the concentration of alloying elements and electrical conductivity. Various contributions to the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy hardening were analyzed. The analysis identified that the dispersion strengthening contribution plays the main role in the nonmonotonic change in the mechanical characteristics. The calculated data correlate with the obtained experimental results.

Keywords: strength; copper alloys; high pressure torsion; electrical conductivity; phase transformations; Cu–0.6Cr–0.1Zr; severe plastic deformation; equal channel angular pressing.

For citation: Aksenov D.A., Faizova S.N., Faizov I.A. Hardening mechanisms contribution at nonmonotonic change of properties in the Cu–0.6Cr–0.1Zr alloy at high pressure torsion. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 23–32. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-23-32.

Распределение микротвердости по поверхности металлического стекла на основе циркония, подвергнутого интенсивной пластической деформации кручением

© 2022

Астанин Василий Владимирович^{1,3}, младший научный сотрудник кафедры электромеханики
Гундеров Дмитрий Валерьевич^{*1,2,4}, доктор физико-математических наук, профессор,
ведущий научный сотрудник
Титов Вячеслав Викторович^{1,5}, аспирант кафедры материаловедения и физики металлов

¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

²Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, Уфа (Россия)

*E-mail: dimagun@mail.ru

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9282-8806>

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5925-4513>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4884-6027>

Поступила в редакцию 18.04.2022

Принята к публикации 14.07.2022

Аннотация: Большой интерес представляет установление особенности трансформации структуры и свойств объемных металлических стекол (ОМС) при воздействии интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК). Известно, что при ИПДК степень деформации разнится от центра к краю диска, что приводит к неоднородности структуры получаемых образцов. Изменение величины микротвердости отражает направление изменения структуры ОМС при ИПДК, а распределение микротвердости – неоднородность ИПДК-образцов. Целью работы является установление влияния ИПДК на величину микротвердости и распределение микротвердости по поверхности образцов аморфных сплавов на примере ОМС Vit105 на основе циркония ($Zr_{52,5}Cu_{17,9}Ni_{14,6}Al_{10}Ti_5$). Исследовано распределение микротвердости по поверхности ОМС Vit105 на основе циркония в исходном состоянии, в состоянии после ИПДК на $n=1$ и $n=5$ оборотов и после релаксирующего отжига. Показано, что исходные ОМС Vit105 характеризуются небольшим разбросом значений микротвердости, что свидетельствует о высокой однородности материала. Релаксирующий отжиг, снижая избыточный свободный объем, приводит к повышению микротвердости без значительного увеличения разброса ее значений. ИПДК приводит к снижению микротвердости циркониевого ОМС, что свидетельствует о росте избыточного свободного объема в результате деформации, но в то же время повышает неравномерность распределения микротвердости по образцу, при этом значения микротвердости в одной половине образца ИПДК ($n=1$) выше, чем в другой. Это показывает, что деформирование образца ОМС в процессе ИПДК обусловлено специфическими механизмами нагружения.

Ключевые слова: объемные металлические стекла; Vit105; интенсивная пластическая деформация кручением.

Благодарности: Интенсивная пластическая деформация кручением проведена при поддержке проекта РНФ № 22-19-00347. Получение аморфных сплавов осуществлено при финансовой поддержке научного проекта РФФИ-а № 20-08-00497. Экспериментальная часть работы выполнена с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» ФГБОУ ВО «УГАТУ».

Для цитирования: Астанин В.В., Гундеров Д.В., Титов В.В. Распределение микротвердости по поверхности металлического стекла на основе циркония, подвергнутого интенсивной пластической деформации кручением // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 33–40. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-33-40.

ВВЕДЕНИЕ

Аморфные металлические сплавы и их подгруппа – объемные металлические стекла (ОМС) – это перспективный класс материалов, обладающий значительным потенциалом для более обширного применения в технике благодаря набору уникальных механических, магнитных свойств и высокой коррозионной стойкости [1; 2]. Аморфные сплавы получают методами быстрой за-
калки расплава при скорости охлаждения расплава порядка 10^6 К/с обычно в виде тонких лент [3]. Однако составы ОМС подобраны таким образом, что аморфная структура может быть получена даже при скорости охлаждения расплава порядка 10^2 К/с, что позволяет получать объемные аморфные образцы диаметром до нескольких сантиметров, а это, в свою очередь, делает

перспективным применение ОМС как специализированных конструкционных материалов [4]. Основными недостатками, препятствующими использованию аморфных сплавов в качестве конструкционных материалов, остаются их высокая хрупкость и низкая термостабильность, обуславливающая сравнительно небольшой температурный диапазон их использования [3].

В последние несколько лет проводились исследования влияния различных методов повышения пластичности ОМС за счет трансформации их структуры [5–7]. Особый интерес для трансформации структуры аморфных сплавов представляет метод интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК), поскольку он позволяет сохранить метастабильность аморфного состояния и реализовать большую деформацию без разрушения материала, что особенно важно для хрупких

и труднодеформируемых сплавов [8; 9]. При осуществлении ИПДК заготовка в форме диска помещается между двумя бойками и затем подвергается одновременному сжатию и кручению под высоким давлением.

В металлических сплавах с кристаллической структурой обработка методом ИПДК приводит к измельчению зерен и формированию ультрамелкозернистой структуры [8; 10]. В сплавах аморфного состояния большая сдвиговая деформация, реализованная методом ИПДК, приводит к формированию локализованных полос сдвига высокой плотности. В результате этого происходят значительные изменения в локальной атомной структуре аморфного сплава [11], изменение его свободного объема и в отдельных случаях нанокристаллизация [12; 13]. При этом изменяются и свойства аморфного металлического материала [14–16]: увеличивается его скоростная чувствительность [17], появляется пластичность на растяжение [5]. В этой связи представляет научный интерес исследование микроструктуры и свойств аморфных сплавов после обработки методом ИПДК. Образцы аморфных сплавов после ИПДК – малые диски диаметром 10 мм и толщиной 0,5 мм. Столь малые размеры затрудняют проведение механических испытаний, например, при сжатии. При испытаниях на растяжение аморфные сплавы склонны к хрупкому разрушению по первой же образовавшейся полосе сдвига, что не позволяет корректно оценить механические характеристики [18]. В то же время измерение микротвердости или нанотвердости является простым и удобным методом оценки изменения механических свойств аморфных сплавов в результате трансформации структуры под действием интенсивной пластической деформации. Ранее было показано, что ИПДК обычно приводит к некоторому уменьшению микротвердости и нанотвердости – примерно на 10 % [19; 20]. Данные, полученные с использованием нанотвердомера, показали также, что ИПДК ОМС $Zr_{62}Cu_{22}Al_{10}Fe_5Du_1$ приводит к росту значений скоростной чувствительности в 2,5 раза в сравнении со значением для исходного состояния [20].

Важным вопросом является распределение микротвердости по поверхности образцов после ИПДК, поскольку известно, что при ИПДК деформация должна различаться от центра к краю, при этом на краю ИПДК-образцов степень деформации максимальна, в центре – минимальна [21]. Микротвердость отражает указанную неоднородность ИПДК-образцов. Но вопрос распределения HV и, соответственно, деформации в подвергнутых ИПДК ОМС изучен недостаточно.

Цель исследования – определение влияния интенсивной пластической деформации кручением на распределение микротвердости по поверхности образцов аморфных сплавов на примере ОМС $Zr_{52,5}Cu_{17,9}Ni_{14,6}Al_{10}Ti_5$.

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве основного материала для исследования был выбран аморфный сплав $Zr_{52,5}Cu_{17,9}Ni_{14,6}Al_{10}Ti_5$ (ат. %), известный также как Vit105. Заготовки аморфного сплава в виде пластин толщиной 2 мм изготовлены в Нанкинском университете науки и технологии методом литья вакуумным всасыванием расплава в медный водоохлаждаемый тигель. Методом пластической деформации являлась интенсивная пластическая

деформация кручением. ИПДК проводилась под давлением в 6 ГПа на 5 оборотов наковален при комнатной температуре на бойках диаметром 10 мм с канавкой глубиной 0,5 мм. Образцы после ИПДК имели диаметр 10 мм и толщину 0,7–1 мм. Образец Vit105 размером $5 \times 2 \times 0,5$ мм подвергался релаксирующему отжигу – выдержке в течение 10 мин в вакууме при температуре 425 °С.

Анализ образцов методом рентгеновской дифракции выполнялся при помощи рентгеновского дифрактометра Bruker D2 Phaser с использованием излучения Cu-K α при ускоряющем напряжении на трубке 30 кВ и токе эмиссии 10 мА в диапазоне углов дифракции 2θ от 20 до 120° с шагом 0,02°, скорость съемки 1 °/мин, использовался многоканальный детектор LynxEye XE-T. Данные, полученные методом рентгеновской дифракции, обрабатывались при помощи программного обеспечения DIFFRAC.EVA v. 5.2.

Исследование механических свойств осуществлялось методом микроиндентирования на автоматическом микротвердомере Emco-Test Durascan 50 с нагрузкой 1 Н при времени выдержки под нагрузкой 10 с, с шагом сетки 0,3–0,6 мм по всей поверхности образцов, а на образцах, подвергнутых ИПДК, – в пределах центральной площадки диаметром 8 мм. Всего было выполнено 100...210 измерений на каждый образец.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Проведенные методами рентгеноструктурного анализа (РСА) исследования показали, что структура ОМС даже после деформации на большое число оборотов наковален остается аморфной, как и после релаксирующего отжига, что согласуется с ранее полученными данными [19]. Дифрактограммы сплава Vit105 в различных состояниях приведены на рис. 1, а рассчитанные из них параметры – в таблице 1. Вид кривых типичен для аморфных материалов, представляет собой серию гало без видимых кристаллических пиков во всех состояниях. ИПДК на $n=1$ оборот приводит к смещению центра тяжести первого аморфного гало в сторону меньших углов. По положению центра тяжести первого аморфного гало можно рассчитать радиус первой координационной сферы R_1 аморфной фазы, а из радиуса первой координационной сферы возможно рассчитать изменение свободного объема аморфной фазы ΔV по методике [22]. Согласно расчетам на основании данных РСА, ИПДК ($n=1$) приводит к увеличению свободного объема ΔV на 1,4 % (таблица 1). Рост ΔV означает рост неравновесности (свободной энергии) аморфной фазы. При дальнейшем увеличении числа оборотов ИПДК до $n=5$ величина ΔV также растет по сравнению с исходным ОМС, но в меньшей степени, чем при ИПДК ($n=1$). Таким образом, при увеличении числа оборотов ИПДК величина ΔV изменяется немонотонно: возрастает до максимума на начальных этапах ИПДК ($n=1$), а с дальнейшим ростом n несколько снижается относительно максимума. Полуширина гало аморфной фазы ведет себя аналогичным образом, увеличиваясь на начальном этапе и снижаясь в дальнейшем. Рост полуширины гало аморфной фазы также означает рост свободной энергии аморфной фазы. Немонотонное изменение ΔV , полуширины гало и, соответственно, свободной энергии ОМС

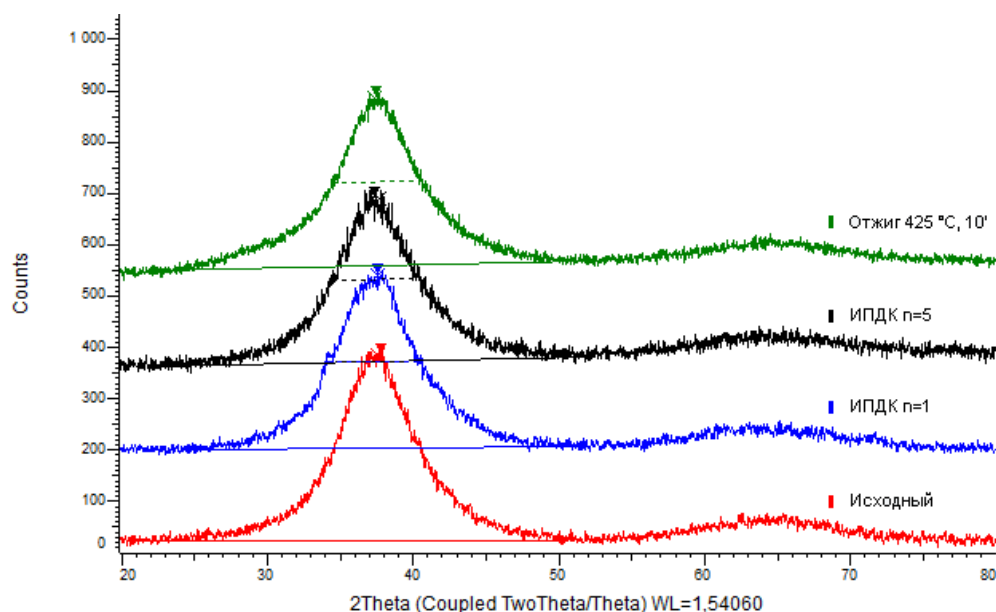


Рис. 1. Дифрактограммы ОМС Vit105 в различных состояниях: исходном, ИПДК ($n=1$), ИПДК ($n=5$), после релаксирующего отжига 10 мин при 425 °C

Fig. 1. Diffraction patterns of Vit105 BMG in various states: initial, HPT ($n=1$), HPT ($n=5$), after relaxing annealing during 10 minutes at 425 °C

Таблица 1. Изменение параметров аморфной структуры, определенных на основании результатов рентгеновской дифракции

Table 1. Change of amorphous structure parameters specified based on the results of X-ray diffraction

Состояние	Ширина гало, °	Угол центра тяжести гало, °	R_1 , Å	ΔV
Отжиг	5,693	37,905	2,917191	-1,64 %
Исходное	5,911	37,689	2,933292	0,00 %
ИПДК ($n=1$)	6,548	37,507	2,947019	1,41 %
ИПДК ($n=5$)	6,172	37,605	2,939602	0,65 %

может быть обусловлено немонотонным изменением степени деформации ОМС при ИПДК, что связано с эффектами проскальзывания при ИПДК твердых материалов [23], в частности ОМС на основе Zr [17]. Об увеличении ΔV в результате ИПДК свидетельствуют и ранее полученные данные дифференциальной сканирующей калориметрии [19]. Релаксирующий отжиг приводит к снижению свободного объема на 1,6 % и уплотнению материала. Следует отметить, что чувствительность метода рентгеновской дифракции к выделению малых объемов нанокристаллической фазы невелика и полностью исключить появление нанокристаллов не представляется возможным.

Исходные ОМС Vit105 характеризуются небольшим разбросом значений микротвердости, что свидетельствует о высокой однородности материала (рис. 2). Релаксирующий отжиг приводит к повышению микротвердости на 10–15 единиц (около 3 %), при этом разброс микротвердости по образцу по-прежнему невелик (рис. 3). Как известно, ИПДК кристаллических материалов приводит к росту их микротвердости в резуль-

тате измельчения кристаллической структуры [7]. Однако в случае ОМС, не имеющих кристаллической структуры, картина иная. ИПДК ОМС Vit105 приводит к снижению средней микротвердости, причем сильное снижение ее значений наблюдается уже после $n=1$ (рис. 4) – примерно на 7 %, а в дальнейшем, после $n=5$, – еще на 3 % (рис. 5), при этом разброс значений увеличивается (рис. 6).

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные данные согласуются с более ранними результатами, которые показали, что при ИПДК ОМС Vit105 высокая степень деформации кручением не реализуется в связи с проскальзыванием бойков по поверхности образца, но при этом структура аморфного сплава значительно трансформируется, оставаясь аморфной [17].

Известно, что при ИПДК существует разница в деформации в центральных и краевых областях образцов-дисков [21]. Это может приводить к более неоднородному

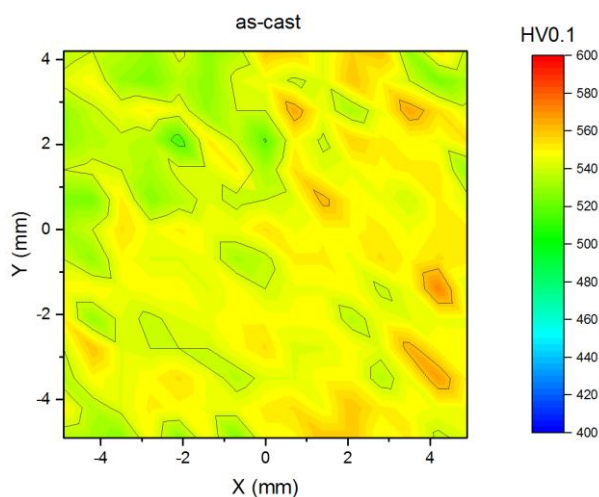


Рис. 2. Распределение микротвердости в исходном образце
Fig. 2. Microhardness distribution in the initial specimen

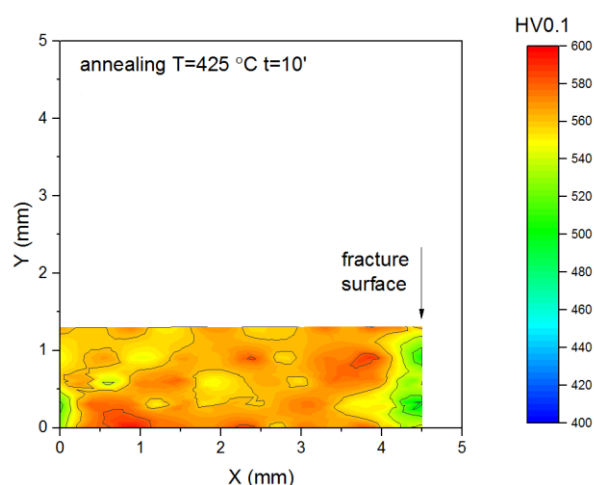


Рис. 3. Распределение микротвердости в образце после релаксирующего отжига при $T=425\text{ }^{\circ}\text{C}$
Fig. 3. Microhardness distribution in the specimen after relaxing annealing at $T=425\text{ }^{\circ}\text{C}$

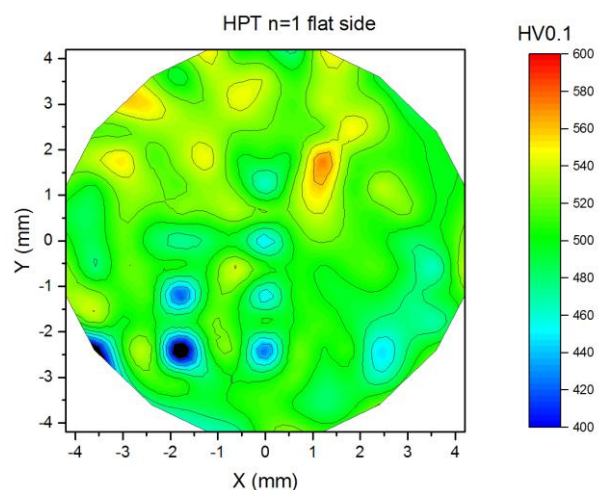


Рис. 4. Распределение микротвердости после ИПДК ($n=1$)
Fig. 4. Microhardness distribution after HPT ($n=1$)

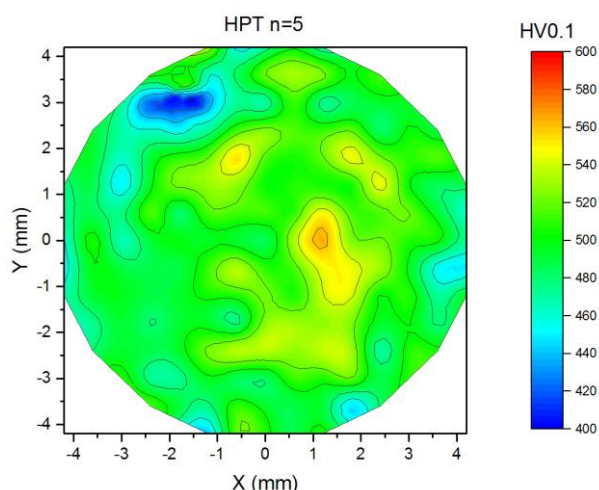


Рис. 5. Распределение микротвердости после ИПДК ($n=5$)
Fig. 5. Microhardness distribution after HPT ($n=5$)

распределению HV по поверхности образцов после ИПДК. Однако на полученной картине распределения HV по поверхности образцов после ИПДК нет однозначной зависимости «центр – край диска» по величинам HV. Как показали предыдущие исследования, при ИПДК высокопрочных материалов ожидаемая деформация кручением не реализуется в связи с проскальзыванием бойков по поверхности образца. Деформация высокопрочных ОМС при ИПДК, по-видимому, реализуется некими другими механизмами. Например, можно предположить, что имеет место взаимный наклон или несоосность бойков, что приводит к реализации при кручении под давлением не схемы чистого сдвига кручением, а более комплексной схемы деформации, в которой кручение сопряжено с периодическим сдавливанием (осадкой) областей образца по окружности в процессе взаимного движения бойков [23]. Повышение свободного объема в результате ИПДК и, соответ-

ственно, увеличение средних межатомных расстояний, т. е. некоторое уменьшение сил межатомного взаимодействия, приводит к наблюдаемому общему понижению микротвердости ОМС. В пользу этого же предположения свидетельствует и неоднородное распределение микротвердости: ее значения в разных половинах образца отличаются (рис. 3, 4). Такая картина подсказывает, что неоднородное распределение твердости может меняться в процессе деформации и фиксироваться последним положением наковален после прекращения деформации. Кроме того, необходимо учитывать, что изменение микротвердости аморфных сплавов при ИПДК может быть вызвано несколькими причинами. Так, ИПДК может приводить к росту свободного объема аморфной фазы, причем этот рост происходит неоднородно по объему образца, поскольку неоднородно и распределение деформации. Кроме того, ИПДК может приводить к формированию полей внутренних

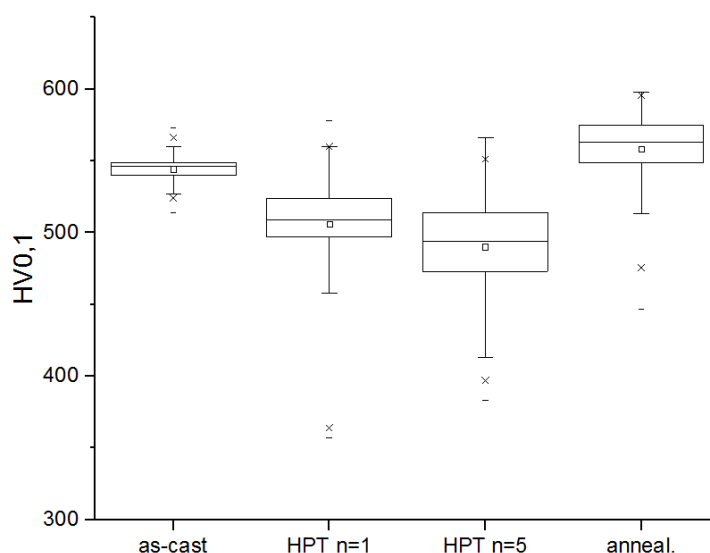


Рис. 6. Статистическое распределение результатов измерения микротвердости в различных состояниях: исходном, ИПДК ($n=1$), ИПДК ($n=5$), после релаксирующего отжига в течение 10 мин при 425 °С

Fig. 6. Statistical distribution of microhardness measurement results in various states: initial, HPT ($n=1$), HPT ($n=5$), after relaxing annealing during 10 minutes at 425 °С

напряжений в образцах, распределение этих полей также неоднородно, и они, в свою очередь, сложным образом влияют на микротвердость. Указанные факторы и приводят к сложной и неоднозначной картине распределения микротвердости на поверхности аморфных сплавов, подвергнутых ИПДК.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Микротвердость циркониевых ОМС тесно связана со свободным объемом материала, величина которого зависит от обработки, термической или деформационной. В исходном состоянии и после релаксационного отжига Vit105 характеризуется небольшим разбросом значений микротвердости, что свидетельствует о высокой однородности материала. Интенсивная пластическая деформация приводит к росту свободного объема и снижению микротвердости и в то же время повышает неравномерность ее распределения по образцу. При этом значения HV в одной половине образца выше, чем в другой. Возможно, это объясняется специфическими механизмами нагружения и деформирования, которым подвергается образец ОМС в процессе ИПДК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kruzic J.J. Bulk Metallic Glasses as Structural Materials: A Review // *Advanced Engineering Materials*. 2016. Vol. 18. № 8. P. 1308–1331. DOI: [10.1002/adem.201600066](https://doi.org/10.1002/adem.201600066).
2. Jafary-Zadeh M., Kumar G.P., Brancio P.S., Seifi M., Lewandowski J.J., Cui F. A Critical Review on Metallic Glasses as Structural Materials for Cardiovascular Stent Applications // *Journal of Functional Biomaterials*. 2018. Vol. 9. № 1. Article number 19. DOI: [10.3390/jfb9010019](https://doi.org/10.3390/jfb9010019).
3. Louzguine-Luzgin D.V., Inoue A. Bulk Metallic Glasses // *Handbook of Magnetic Materials*. Japan: Elsevier, 2013. Vol. 21. P. 131–171. DOI: [10.1016/B978-0-444-59593-5.00003-9](https://doi.org/10.1016/B978-0-444-59593-5.00003-9).
4. Axinte E. Metallic glasses from “alchemy” to pure science: Present and future of design, processing and applications of glassy metals // *Materials and Design*. 2012. Vol. 35. P. 518–556. DOI: [10.1016/j.matdes.2011.09.028](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2011.09.028).
5. Joo S.-H., Pi D.-H., Setyawan A.D.H., Kato H., Janecek M., Kim Y.C., Lee S., Kim H.S. Work-Hardening Induced Tensile Ductility of Bulk Metallic Glasses via High-Pressure Torsion // *Scientific Reports*. 2015. Vol. 5. № 1. Article number 9660. DOI: [10.1038/srep09660](https://doi.org/10.1038/srep09660).
6. Ren Z.Q., Churakova A.A., Wang X., Goel S., Liu S.N., You Z.S., Liu Y., Lan S., Gunderov D.V., Wang J.T., Valiev R.Z. Enhanced tensile strength and ductility of bulk metallic glasses Zr52.5Cu17.9Al10Ni14.6Ti5 via high-pressure torsion // *Materials Science and Engineering A*. 2021. Vol. 803. Article number 140485. DOI: [10.1016/j.msea.2020.140485](https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.140485).
7. Révész Á., Kovács Z. Severe Plastic Deformation of Amorphous Alloys // *Materials Transactions*. 2019. Vol. 60. № 7. P. 1283–1293. DOI: [10.2320/matertrans.MF201917](https://doi.org/10.2320/matertrans.MF201917).
8. Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V. Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation // *Progress in Materials Science*. 2000. Vol. 45. № 2. P. 103–189. DOI: [10.1016/S0079-6425\(99\)00007-9](https://doi.org/10.1016/S0079-6425(99)00007-9).
9. Valiev R.Z., Zehetbauer V.J., Estrin Y., Hoppel H.W., Ivanisenko Y., Hahm H., Wilde G., Roven H.J., Sauvage X., Langdon T.G. The innovation potential of bulk nanostructured materials // *Advanced Engineering Materials*. 2007. Vol. 9. № 7. P. 527–533. DOI: [10.1002/adem.200700078](https://doi.org/10.1002/adem.200700078).

10. Edalati K., Horita Z. A review on high-pressure torsion (HPT) from 1935 to 1988 // *Materials Science and Engineering A*. 2016. Vol. 652. P. 325–352. DOI: [10.1016/j.msea.2015.11.074](https://doi.org/10.1016/j.msea.2015.11.074).
11. Wang X.D., Cao Q.P., Jiang J.Z., Franz H., Schroers J., Valiev R.Z., Ivanisenko Y., Gleiter H., Fecht H.-J. Atomic-level structural modifications induced by severe plastic shear deformation in bulk metallic glasses // *Scripta Materialia*. 2011. Vol. 64. № 1. P. 81–84. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2010.09.015](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2010.09.015).
12. Glezer A.M., Sundeev R.V., Shalimova A.V. The cyclic character of phase transformations of the crystal \leftrightarrow amorphous state type during severe plastic deformation of the Ti50Ni25Cu25 alloy // *Doklady Physics*. 2011. Vol. 56. № 9. P. 476–478. DOI: [10.1134/S1028335811090035](https://doi.org/10.1134/S1028335811090035).
13. Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Y., Blank V.D., Botta W.J., Bryla K., Cizek J., Divinski S., Enikeev N.A., Estrin Y., Faraji G. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances // *Materials Research Letters*. 2022. Vol. 10. № 4. P. 163–256. DOI: [10.1080/21663831.2022.2029779](https://doi.org/10.1080/21663831.2022.2029779).
14. Hóbor S., Kovács Z., Révész Á. Macroscopic thermo-plastic model applied to the high pressure torsion of metallic glasses // *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 106. № 2. Article number 023531. DOI: [10.1063/1.3176950](https://doi.org/10.1063/1.3176950).
15. Henits P., Révész Á., Kovács Z. Free volume simulation for severe plastic deformation of metallic glasses // *Mechanics of Materials*. 2012. Vol. 50. P. 81–87. DOI: [10.1016/j.mechmat.2012.03.008](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2012.03.008).
16. Révész A., Schafner E., Kovács Z. Structural anisotropy in a Zr57Ti5Cu20Al10Ni8 bulk metallic glass deformed by high pressure torsion at room temperature // *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 92. № 1. Article number 011910. DOI: [10.1063/1.2830992](https://doi.org/10.1063/1.2830992).
17. Gunderov D., Astanin V. Influence of HPT Deformation on the Structure and Properties of Amorphous Alloys // *Metals*. 2020. Vol. 10. № 3. Article number 415. DOI: [10.3390/met10030415](https://doi.org/10.3390/met10030415).
18. Kosiba K., Šopu D., Scudino S., Zhang L., Bednarcik J., Pauly S. Modulating heterogeneity and plasticity in bulk metallic glasses: Role of interfaces on shear banding // *International Journal of Plasticity*. 2019. Vol. 119. P. 156–170. DOI: [10.1016/j.ijplas.2019.03.007](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.03.007).
19. Gunderov D., Astanin V., Churakova A., Sitdikov V., Ubyivovk E., Islamov A., Wang J.T. Influence of High-Pressure Torsion and Accumulative High-Pressure Torsion on Microstructure and Properties of Zr-Based Bulk Metallic Glass Vit105 // *Metals*. 2020. Vol. 10. № 11. P. 1–14. DOI: [10.3390/met10111433](https://doi.org/10.3390/met10111433).
20. Boltynjuk E.V., Gunderov D.V., Ubyivovk E.V., Monclus M.A., Yang L.W., Molina-Aldareguia J.M., Tyurin A.I., Kilmametov A.R., Churakova A.A., Churyumov A.Yu., Valiev R.Z. Enhanced strain rate sensitivity of Zr-based bulk metallic glasses subjected to high pressure torsion // *Journal of Alloys and Compounds*. 2018. Vol. 747. P. 595–602. DOI: [10.1016/j.jallcom.2018.03.018](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.03.018).
21. Ebner C., Escher B., Gammer C., Eckert J., Pauly S., Rentenberger C. Structural and mechanical characterization of heterogeneities in a CuZr-based bulk metallic glass processed by high pressure torsion // *Acta Materialia*. 2018. Vol. 160. P. 147–157. DOI: [10.1016/j.actamat.2018.08.032](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.08.032).
22. Gunderov D.V., Boltynjuk E.V., Sitdikov V.D., Abrosimova G.E., Churakova A.A., Kilmametov A.R., Valiev R.Z. Free volume measurement of severely deformed Zr62Cu22Al10Fe5Dy1 bulk metallic glass // *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. Vol. 1134. № 1. Article number 012010. DOI: [10.1088/1742-6596/1134/1/012010](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1134/1/012010).
23. Gunderov D.V., Asfandiyarov R.N., Raab G.I., Churakova A.A., Astanin V.V. Method for slippage evaluation at various stages of high-pressure torsion and its application to Fe-0.1 %C // *Letters on Materials*. 2021. Vol. 11. № 4. P. 416–421. DOI: [10.22226/2410-3535-2021-4-416-421](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-4-416-421).

REFERENCES

- Kruzic J.J. Bulk Metallic Glasses as Structural Materials: A Review. *Advanced Engineering Materials*, 2016, vol. 18, no. 8, pp. 1308–1331. DOI: [10.1002/adem.201600066](https://doi.org/10.1002/adem.201600066).
- Jafary-Zadeh M., Kumar G.P., Branicio P.S., Seifi M., Lewandowski J.J., Cui F. A Critical Review on Metallic Glasses as Structural Materials for Cardiovascular Stent Applications. *Journal of Functional Biomaterials*, 2018, vol. 9, no. 1, article number 19. DOI: [10.3390/jfb9010019](https://doi.org/10.3390/jfb9010019).
- Louzguine-Luzgin D.V., Inoue A. Bulk Metallic Glasses. *Handbook of Magnetic Materials*. Japan, Elsevier Publ., 2013. Vol. 21, pp. 131–171. DOI: [10.1016/B978-0-444-59593-5.00003-9](https://doi.org/10.1016/B978-0-444-59593-5.00003-9).
- Axinte E. Metallic glasses from “alchemy” to pure science: Present and future of design, processing and applications of glassy metals. *Materials and Design*, 2012, vol. 35, pp. 518–556. DOI: [10.1016/j.matdes.2011.09.028](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2011.09.028).
- Joo S.-H., Pi D.-H., Setyawan A.D.H., Kato H., Janecek M., Kim Y.C., Lee S., Kim H.S. Work-Hardening Induced Tensile Ductility of Bulk Metallic Glasses via High-Pressure Torsion. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, no. 1, article number 9660. DOI: [10.1038/srep09660](https://doi.org/10.1038/srep09660).
- Ren Z.Q., Churakova A.A., Wang X., Goel S., Liu S.N., You Z.S., Liu Y., Lan S., Gunderov D.V., Wang J.T., Valiev R.Z. Enhanced tensile strength and ductility of bulk metallic glasses Zr52.5Cu17.9Al10Ni14.6Ti5 via high-pressure torsion. *Materials Science and Engineering A*, 2021, vol. 803, article number 140485. DOI: [10.1016/j.msea.2020.140485](https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.140485).
- Révész Á., Kovács Z. Severe Plastic Deformation of Amorphous Alloys. *Materials Transactions*, 2019, vol. 60, no. 7, pp. 1283–1293. DOI: [10.2320/matertrans.MF201917](https://doi.org/10.2320/matertrans.MF201917).
- Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V. Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation. *Progress in Materials Science*, 2000, vol. 45, no. 2, pp. 103–189. DOI: [10.1016/S0079-6425\(99\)00007-9](https://doi.org/10.1016/S0079-6425(99)00007-9).
- Valiev R.Z., Zehetbauer V.J., Estrin Y., Hoppel H.W., Ivanisenko Y., Hahm H., Wilde G., Roven H.J., Sauvage X., Langdon T.G. The innovation potential of bulk nanostructured materials. *Advanced Engineering*

- Materials*, 2007, vol. 9, no. 7, pp. 527–533. DOI: [10.1002/adem.200700078](https://doi.org/10.1002/adem.200700078).
10. Edalati K., Horita Z. A review on high-pressure torsion (HPT) from 1935 to 1988. *Materials Science and Engineering A*, 2016, vol. 652, pp. 325–352. DOI: [10.1016/j.msea.2015.11.074](https://doi.org/10.1016/j.msea.2015.11.074).
 11. Wang X.D., Cao Q.P., Jiang J.Z., Franz H., Schroers J., Valiev R.Z., Ivanisenko Y., Gleiter H., Fecht H.-J. Atomic-level structural modifications induced by severe plastic shear deformation in bulk metallic glasses. *Scripta Materialia*, 2011, vol. 64, no. 1, pp. 81–84. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2010.09.015](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2010.09.015).
 12. Glezer A.M., Sundeev R.V., Shalimova A.V. The cyclic character of phase transformations of the crystal \leftrightarrow amorphous state type during severe plastic deformation of the Ti50Ni25Cu25 alloy. *Doklady Physics*, 2011, vol. 56, no. 9, pp. 476–478. DOI: [10.1134/S1028335811090035](https://doi.org/10.1134/S1028335811090035).
 13. Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Y., Blank V.D., Botta W.J., Bryla K., Cizek J., Divinski S., Enikeev N.A., Estrin Y., Faraji G. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances. *Materials Research Letters*, 2022, vol. 10, no. 4, pp. 163–256. DOI: [10.1080/21663831.2022.2029779](https://doi.org/10.1080/21663831.2022.2029779).
 14. Hóbor S., Kovács Z., Révész Á. Macroscopic thermo-plastic model applied to the high pressure torsion of metallic glasses. *Journal of Applied Physics*, 2009, vol. 106, no. 2, article number 023531. DOI: [10.1063/1.3176950](https://doi.org/10.1063/1.3176950).
 15. Henits P., Révész Á., Kovács Z. Free volume simulation for severe plastic deformation of metallic glasses. *Mechanics of Materials*, 2012, vol. 50, pp. 81–87. DOI: [10.1016/j.mechmat.2012.03.008](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2012.03.008).
 16. Révész Á., Schafner E., Kovács Z. Structural anisotropy in a Zr57Ti5Cu20Al10Ni8 bulk metallic glass deformed by high pressure torsion at room temperature. *Applied Physics Letters*, 2008, vol. 92, no. 1, article number 011910. DOI: [10.1063/1.2830992](https://doi.org/10.1063/1.2830992).
 17. Gunderov D., Astanin V. Influence of HPT Deformation on the Structure and Properties of Amorphous Alloys. *Metals*, 2020, vol. 10, no. 3, article number 415. DOI: [10.3390/met10030415](https://doi.org/10.3390/met10030415).
 18. Kosiba K., Şopu D., Scudino S., Zhang L., Bednarcik J., Pauly S. Modulating heterogeneity and plasticity in bulk metallic glasses: Role of interfaces on shear banding. *International Journal of Plasticity*, 2019, vol. 119, pp. 156–170. DOI: [10.1016/j.ijplas.2019.03.007](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.03.007).
 19. Gunderov D., Astanin V., Churakova A., Sitdikov V., Ubyivovk E., Islamov A., Wang J.T. Influence of High-Pressure Torsion and Accumulative High-Pressure Torsion on Microstructure and Properties of Zr-Based Bulk Metallic Glass Vit105. *Metals*, 2020, vol. 10, no. 11, pp. 1–14. DOI: [10.3390/met10111433](https://doi.org/10.3390/met10111433).
 20. Boltynjuk E.V., Gunderov D.V., Ubyivovk E.V., Monclus M.A., Yang L.W., Molina-Aldareguia J.M., Tyurin A.I., Kilmametov A.R., Churakova A.A., Churyumov A.Yu., Valiev R.Z. Enhanced strain rate sensitivity of Zr-based bulk metallic glasses subjected to high pressure torsion. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, vol. 747, pp. 595–602. DOI: [10.1016/j.jallcom.2018.03.018](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.03.018).
 21. Ebner C., Escher B., Gammer C., Eckert J., Pauly S., Rentenberger C. Structural and mechanical characterization of heterogeneities in a CuZr-based bulk metallic glass processed by high pressure torsion. *Acta Materialia*, 2018, vol. 160, pp. 147–157. DOI: [10.1016/j.actamat.2018.08.032](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.08.032).
 22. Gunderov D.V., Boltynjuk E.V., Sitdikov V.D., Abrosimova G.E., Churakova A.A., Kilmametov A.R., Valiev R.Z. Free volume measurement of severely deformed Zr62Cu22Al10Fe5Dy1 bulk metallic glass. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, vol. 1134, no. 1, article number 012010. DOI: [10.1088/1742-6596/1134/1/012010](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1134/1/012010).
 23. Gunderov D.V., Asfandiyarov R.N., Raab G.I., Churakova A.A., Astanin V.V. Method for slippage evaluation at various stages of high-pressure torsion and its application to Fe-0.1 %C. *Letters on Materials*, 2021, vol. 11, no. 4, pp. 416–421. DOI: [10.22226/2410-3535-2021-4-416-421](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-4-416-421).

Microhardness distribution over the surface of Zr-based metallic glass exposed to high-pressure torsion

© 2022

Vasily V. Astanin^{1,3}, junior researcher of Chair of Electrical EngineeringDmitry V. Gunderov^{*1,2,4}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, leading researcherVyacheslav V. Titov^{1,5}, postgraduate student of Chair of Materials Science and Physics of Metals¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)²Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa (Russia)*E-mail: dimagun@mail.ru³ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9282-8806>⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5925-4513>⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4884-6027>

Received 18.04.2022

Accepted 14.07.2022

Abstract: Identifying the peculiarities of the transformation of the structure and properties of bulk metallic glass (BMG) under high-pressure torsion (HPT) is of great interest. It is known that under HPT, the degree of deformation differs from the center to the edge of a disk which leads to the non-uniformity of the structure of obtained specimens. The change in microhardness value indicates the direction of change in BMG structure under the HPT, and the microhardness distribution indicates the HPT-specimen non-uniformity. The aim of the study is to identify the HPT influence on

the microhardness value and microhardness distribution over the surface of specimens of amorphous alloys using an example of Vit105 Zr-based BMG ($Zr_{52.5}Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10}Ti_5$). The authors studied the distribution of microhardness over the surface of Vit105 Zr-based BMG in the initial state, in the state after HPT at $n=1$ and $n=5$ rotations, and after relaxing annealing. The study shows that the initial Vit105 BMG is characterized by a small spread in microhardness values, which indicates the material's high homogeneity. By reducing the excessive free volume, relaxing annealing increases microhardness without a significant increase in the spread of its values. HPT leads to a decrease in the zirconium BMG microhardness, which indicates an increase in the excessive free volume, but, at the same time, increases the uneven microhardness distribution over the specimen, while the microhardness values in one half of the HPT sample ($n=1$) are higher than in the other one. It demonstrates that BMG specimen deformation during HPT is related to the specific loading mechanisms.

Keywords: bulk metallic glass; Vit105; high-pressure torsion.

Acknowledgements: The authors carried out the severe high-pressure torsion under the support of the RSF project No. 22-19-00347. The amorphous alloys were produced under the financial support of the scientific project-a No. 20-08-00497 of the Russian Foundation for Basic Research. The experimental part of the work was carried out on the equipment of the Research Equipment Sharing Center “Nanotech” of Ufa State Aviation Technical University.

For citation: Astanin V.V., Gunderov D.V., Titov V.V. Microhardness distribution over the surface of Zr-based metallic glass exposed to high-pressure torsion. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 33–40. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-33-40.

Шероховатость и микротвердость ультрамелкозернистого титана Grade 4, подвергнутого безабразивной ультразвуковой финишной обработке

© 2022

*Асфандияров Рашид Наилевич**^{1,2,4}, кандидат технических наук, научный сотрудник,
доцент кафедры материаловедения и физики металлов

*Рааб Георгий Иосифович*³, доктор технических наук, ведущий научный сотрудник

Гундеров Дмитрий Валерьевич^{1,2,5}, доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник института физики молекул и кристаллов,
профессор кафедры материаловедения и физики металлов

Аксенов Денис Алексеевич^{1,2,6}, младший научный сотрудник

*Рааб Арсений Георгиевич*², кандидат технических наук, научный сотрудник

*Гундерова Софья Дмитриевна*², студент

*Шишкунова Мария Андреевна*², магистрант

¹Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, Уфа (Россия)

²Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

³Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, Магнитогорск (Россия)

*E-mail: a.r.n@list.ru

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5522-4314>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5925-4513>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2652-2646>

Поступила в редакцию 28.04.2022

Принята к публикации 16.08.2022

Аннотация: Повышение сопротивления усталости имплантатов является важной научно-технической задачей. Одним из решений данной задачи является формирование высокопрочного состояния за счет ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры. Однако для высокопрочных сплавов характерна большая чувствительность к концентраторам напряжений и параметру шероховатости поверхности. В свою очередь, конструкции имплантатов, как правило, подразумевают наличие концентраторов в виде различных канавок, резьбовых элементов и т. д., а технология их изготовления подразумевает механическую обработку с неоднозначным влиянием на поверхность готового изделия. Вариантом решения обозначенной проблемы является применение дополнительной финишной обработки поверхности, например методом безабразивной ультразвуковой финишной обработки (БУФО). Целью настоящей работы является исследование влияния различных режимов БУФО на микротвердость и шероховатость цилиндрической заготовки из технически чистого титана марки Grade 4 в УМЗ состоянии. В ходе исследования проведена оценка влияния на параметры поверхности частоты вращения заготовки и статической силы прижатия инструмента к обрабатываемой заготовке. Проведены микроструктурные исследования полученных образцов. Результаты показали, что обработка титана в УМЗ состоянии методом БУФО приводит к значительному повышению микротвердости поверхности и снижению ее шероховатости. Так, в зависимости от режима прирост микротвердости может достигать от 2 до 3,5 раз. Было изучено влияние уровня мощности ультразвукового воздействия на шероховатость и микротвердость. Рассмотрены различные варианты предварительной обработки поверхности. Выявлено, что увеличение скорости вращения заготовки уменьшает шероховатость обработанной заготовки, а микротвердость при этом увеличивается.

Ключевые слова: безабразивная ультразвуковая финишная обработка; УМЗ; ультрамелкозернистая структура титана Grade 4; шероховатость; микротвердость.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-00124, <https://rscf.ru/project/21-79-00124/>.

Для цитирования: Асфандияров Р.Н., Рааб Г.И., Гундеров Д.В., Аксенов Д.А., Рааб А.Г., Гундерова С.Д., Шишкунова М.А. Шероховатость и микротвердость ультрамелкозернистого титана Grade 4, подвергнутого безабразивной ультразвуковой финишной обработке // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 41–49. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-41-49.

ВВЕДЕНИЕ

подавляющее большинство имплантатов в организме человека работают в условиях активных нагрузок, вызывающих повторные или повторно-переменные напряжения. При длительном воздействии данных напряжений в материале имплантата происходит изменение свойств, постепенное накопление повреждений, зарождение и развитие трещины, и в конечном итоге разрушение. Такое разрушение является усталостным

и относится к наиболее распространенным причинам выхода изделий из строя. Имплантаты относятся к особо ответственным изделиям, так как от их качества и надежности зависит здоровье, а в ряде случаев и жизнь пациентов. Исходя из вышесказанного, повышение сопротивления усталости имплантатов является важной научно-технической задачей.

Решение проблемы повышения сопротивления усталости имплантатов осложняет ряд особенностей процесса усталостного разрушения, в том числе зависимость

от химического состава материала, размеров, формы, состояния поверхности, условий нагружения. Одним из широко используемых материалов для имплантатов является титан и его сплавы за счет ряда преимуществ титана, таких как хорошая биосовместимость, высокая коррозионная стойкость и т. д. Однако усталостные характеристики технически чистого титана не всегда удовлетворяют современным требованиям, а применение легирующих элементов в сплавах может оказывать негативное влияние на организм пациента. Одним из решений данной проблемы является использование технически чистого титана, подвергнутого деформационной упрочняющей обработке. Одним из приемов, приводящих к заметному повышению механических и усталостных свойств металлических материалов, является формирование ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры [1–3]. Эффективным подходом к формированию УМЗ структуры является интенсивная пластическая деформация (ИПД), например равноканальное угловое прессование (РКУП), РКУП-Конформ [4]. Исследования показывают преимущества такого подхода для повышения механических свойств T_i и ряда титановых сплавов медицинского назначения [2–4]. Так, после РКУП в технически чистом титане формируется структура с размером зерен/субзерен порядка 200 нм, а предел прочности при этом возрастает с 700 до 1100 МПа [4]. Уже разработана технология получения прутков наноструктурного титана на основе производительного метода РКУП-Конформ для медицинского применения и последующей деформации волочением. В полученных прутках зерно измельчается до 100 нм, а предел прочности достигает 1250 МПа [5; 6]. Стоит отметить, что увеличение прочности металлов и сплавов не сопровождается соответствующим ростом сопротивления усталости, а относительное сопротивление усталости у высокопрочных металлов и сплавов, как правило, ниже, чем у среднепрочных сплавов. Для высокопрочных сплавов характерны также большая чувствительность к концентраторам напряжений и параметру шероховатости поверхности, поэтому относительное сопротивление усталости у элементов конструкций из высокопрочных сплавов зачастую ниже, чем у материалов, обладающих средними показателями прочности [7; 8].

Механическая обработка (точение, фрезерование, сверление и т. д.) является неотъемлемой частью технологии изготовления имплантатов. Для механической обработки характерно одновременное разнонаправленное и неоднозначное воздействие на поверхность изделия в виде нагрева, пластической деформации, структурных изменений и др. При этом механическая обработка зависит от большого количества факторов, например режима резания, точности оборудования, жесткости системы, что в результате приводит к появлению на поверхности изделия неравномерных деформаций, остаточных напряжений, существенных микронеровностей, являющихся дополнительными концентраторами напряжений. Сформированные в результате обработки параметры поверхности, такие как шероховатость, микротвердость, остаточные напряжения, характеризуют ее качество и в конечном итоге – ряд эксплуатационных свойств изделия, в том числе сопротивление усталости и износостойкость [9]. Таким образом, в случае особо ответственных изделий, к которым относятся имплан-

таты, необходимо применять дополнительную финишную обработку поверхности, которая позволит обеспечить заданные параметры и повысить эксплуатационные свойства готовой продукции.

Анализ литературных данных показал, что одним из эффективных подходов к финишной обработке поверхности, позволяющих решить задачу повышения уровня свойств поверхности, являются методы поверхностно-пластического деформирования (ППД), среди которых обдужка дробью, обкатка роликами, ультразвуковая обработка поверхности и др. Обработка методами ППД приводит к интенсивному измельчению структуры до субмикроструктурного и нанокристаллического состояния в поверхностных слоях заготовки. При этом наблюдается градиентное распределение по размеру зерна, с более мелкими зернами ближе к поверхности [10–12].

Среди методов ППД стоит выделить безабразивную ультразвуковую финишную обработку (БУФО). Основной ее задачей является упрочняющая отделочная обработка, в результате которой происходит снижение шероховатости поверхности и ее упрочнение, а также формирование преимущественно сжимающих остаточных напряжений. Процесс БУФО представляет собой импульсно-упрочняющую чистовую обработку с применением ультразвуковых колебаний [13]. Применение ультразвуковых колебаний как основы метода ППД имеет ряд преимуществ перед другими способами ППД, так, согласно [14], в условиях высокочастотного циклического воздействия ультразвуковых колебаний влияние на повышение усталостной прочности при упрочнении поверхности титана определяют не только поверхностные остаточные напряжения и степень пластической деформации, но и особенности структурного состояния обработанной поверхности. Авторы отмечают, что такими особенностями являются повышенная плотность дислокаций, значительные микроискажения, интенсивное торможение различных структурных дефектов, изменение энергетического состояния, фазовые превращения и др. В статье говорится о том, что упрочненный слой ограничивает выход дислокаций на поверхность при циклическом деформировании, обуславливая этим повышение общей энергоемкости материала и, как следствие, рост сопротивления усталости. Авторами работы [14] показано, что применение ультразвуковой финишной обработки ведет к существенному повышению усталостной прочности титана вплоть до 50 %. А градиентное структурное состояние, формирующееся при этом, приводит к повышению ряда эксплуатационных характеристик, например износостойкости [15–17].

К преимуществам метода БУФО также относится возможность обработки на различных металлообрабатывающих станках: токарном, фрезерном и т. д. [18–20].

Анализ литературы показал, что на текущий момент комплексных исследований обработки металлов в УМЗ состоянии методом безабразивной ультразвуковой финишной обработки не существует. Однако, исходя из вышесказанного, исследования в этом направлении довольно актуальны.

Цель работы – исследование влияния различных режимов БУФО на микротвердость и шероховатость цилиндрической заготовки из технически чистого титана марки Grade 4 в УМЗ состоянии.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Суть метода БУФО заключается в поверхностном пластическом деформировании обрабатываемой металлической заготовки посредством механических колебаний деформирующего индентора с ультразвуковой частотой. Механические колебания обеспечиваются ультразвуковым генератором, магнитоотрицательным преобразователем и волноводом-концентратором [13].

На рис. 1 представлен комплект оборудования для осуществления метода БУФО – ультразвуковая установка для упрочняюще-чистовой обработки деталей И-4/1-2.0 (ООО «Ультразвуковая техника – ИНЛАБ», Санкт-Петербург, Россия), которая использовалась в данной работе.

На рис. 2 представлен индентор, использованный в настоящем исследовании. Рабочая часть данного индентора имеет сферическую форму с радиусом закругления $R=3$ мм и изготовлена из твердого сплава.

Для проведения экспериментальных работ в исследовании была использована заготовка круглого сечения диаметром 9,5 мм из технически чистого титана марки Grade 4 в УМЗ состоянии, полученном методами РКУП-Конформ и волочения. Образцы изготавливались следующим образом: исходный пруток диаметром 12 мм покрывали смазкой, нагревали в печи до 300 ± 10 °С, проводили обработку методом РКУП-Конформ (квадратное сечение) при температуре 300 ± 10 °С в 6 циклов по маршруту Вс; далее при температуре 300 ± 10 °С проводили обработку методом волочения до диаметра 12 мм с накопленной степенью деформации $\epsilon=0,15$. На финальном этапе полученный пруток нарезали на мерные штучные заготовки длиной 50 мм с последующей отбочкой на токарном станке до диаметра 9,5 мм.

При обработке методом БУФО используются следующие технологические параметры.

Шаг продольной подачи инструмента и частота/скорость вращения заготовки, определяющие перекрытие между обработанными областями после ударов индентора. В исследовании шаг продольной подачи принят постоянным и равным 0,028 мм/об, рассмотрено 3 варианта частоты вращения: 500, 1000 и 1600 об/мин.

Статическая сила прижатия индентора к обрабатываемой заготовке. В случае приложения чрезмерной силы возможно разрушение поверхностного слоя, что проявляется в ухудшении шероховатости поверхности [29]. Для определения силы прижатия в исследовании ультразвуковой инструмент с помощью специальной оснастки был зажат в резцедержатель токарного станка через пружинный элемент (рис. 3). С помощью электронного безмена было проведено тарирование «сила прижатия – натяг на станке». В работе рассматривали 3 варианта силы прижатия: 25, 50 и 100 Н.

Мощность ультразвукового генератора, определяющая амплитуду механических колебаний индентора, т. е. фактически глубину проработки. Используемый в работе генератор имеет выходную мощность 2 кВт. В исследовании рассматривали 50, 75 и 100 % его мощности.

В рамках проведенной работы рассмотрено 3 варианта предварительной обработки поверхности: непосредственно после резца (чистовое точение), шлифование наждачной бумагой с зернистостью P600 и P1000.

На рис. 3 показана установка для БУФО, закрепленная на токарном станке. Охлаждение заготовки в процессе обработки осуществляли с помощью подведения смазывающе-охлаждающей жидкости – смеси машинного масла и воды. Охлаждение магнитоотрицательного преобразователя осуществлялось водой. Рабочая частота генератора – 22 кГц.

Эффективность повышения механических характеристик образцов была оценена по параметрам микротвердости, микроструктуры, глубине проработки (наклепа), шероховатости.

Структурные исследования проводились на растровом электронном микроскопе Jeol JSM-6490LV (JEOL Ltd., Япония) в режиме вторичных электронов.

Измерение микротвердости проводилось на микротвердомере Emco-Test DuraScan-50 (EMCO-TEST PrüfmaSchinen GmbH, Австрия) при нагрузке 100 гр. Величину микротвердости определяли как среднее арифметическое значение по 10 отпечаткам индентора. Определение параметров шероховатости (рис. 4) производили с помощью профилометра TR220 (TIME Group Inc., Китай).

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 5 изображен образец, полученный в результате обработки методом БУФО в различных режимах.

Анализ микроструктуры образцов в исходном состоянии (рис. 6) показал, что после 6 циклов РКУП-Конформ и последующего волочения средний поперечный размер структурных фрагментов титана марки Grade 4 составил 180 ± 26 нм. Микротвердость в исходном состоянии составила 2590 ± 60 МПа, шероховатость $Ra=8,59$.

Обработка методом БУФО во всех представленных режимах привела к существенному повышению микротвердости поверхности от 2 до 3,5 раз и снижению параметра шероховатости Ra (таблица 1). Максимальное значение микротвердости достигает 8930 ± 70 МПа и наблюдается в режиме № 7. Минимальная шероховатость наблюдается в режиме № 1 и составляет $Ra=0,25$.

БУФО в режиме $P=25$ Н, $n=1000$ об/мин, шлифование P1000 привела к увеличению микротвердости относительно исходного состояния в 2 раза до 5190 ± 50 МПа, параметр шероховатости при этом снизился до $Ra=0,25$. Увеличение силы до 50 Н приводит к дальнейшему увеличению микротвердости до 7775 ± 65 МПа, однако и шероховатость при этом имеет большее значение $Ra=0,38$. При увеличении силы прижатия до 100 Н процесс обработки стал менее стабильным, микротвердость при этом оказалась на 1500 МПа ниже, чем при 50 Н, однако шероховатость составила $Ra=0,30$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Исследование влияния мощности ультразвукового воздействия показало, что увеличение мощности ведет к линейному увеличению микротвердости, при этом параметр шероховатости становится больше. Это можно связать с тем, что мощность ультразвукового воздействия фактически определяет амплитуду колебаний индентора, т. е. глубину проникновения, и, при недостаточной скорости вращения, в условиях большой амплитуды



Рис. 1. Ультразвуковая установка для упрочняюще-чистовой обработки деталей И-4/1-2.0
Fig. 1. I-4/1-2.0 ultrasonic device for hardening and finishing of parts

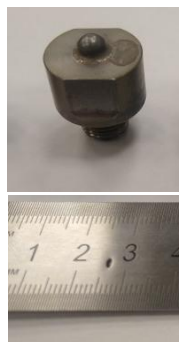


Рис. 2. Деформирующий индентор.
Радиус закругления $R=3$ мм
Fig. 2. Deforming indenter. Rounded radius $R=3$ mm

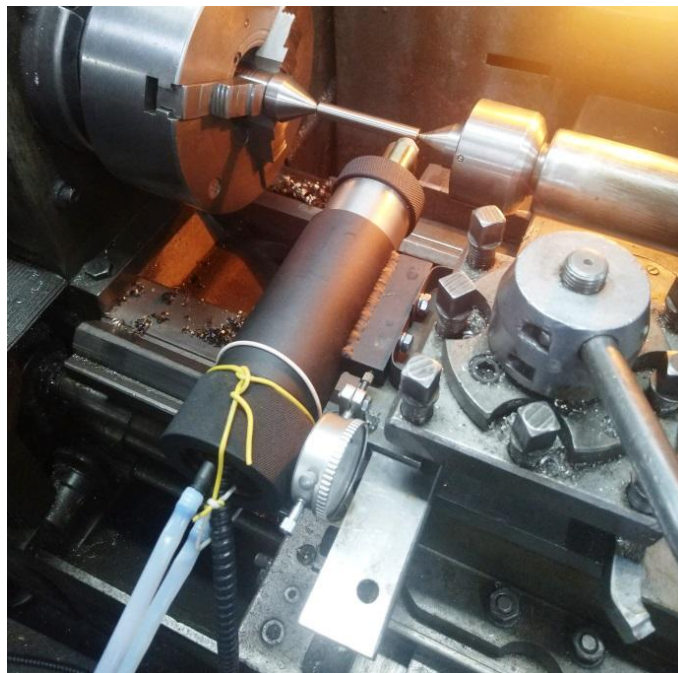


Рис. 3. Оборудование для БУФО, установленное на токарном станке
Fig. 3. The equipment for abrasive-free ultrasonic finishing (AFUF) installed on a lathe

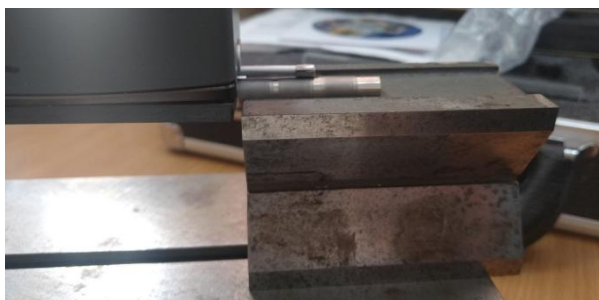


Рис. 4. Измерение шероховатости образца
Fig. 4. Sample roughness measurement

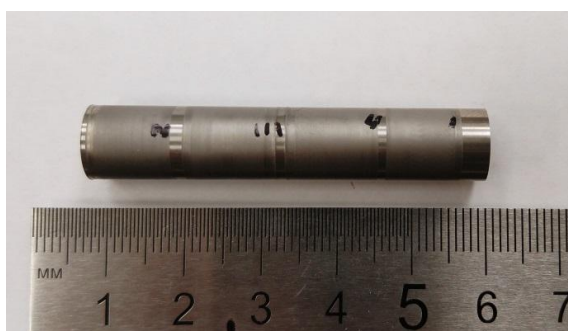
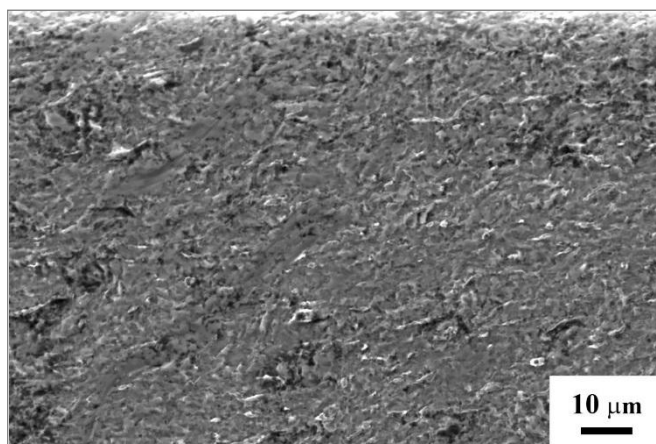
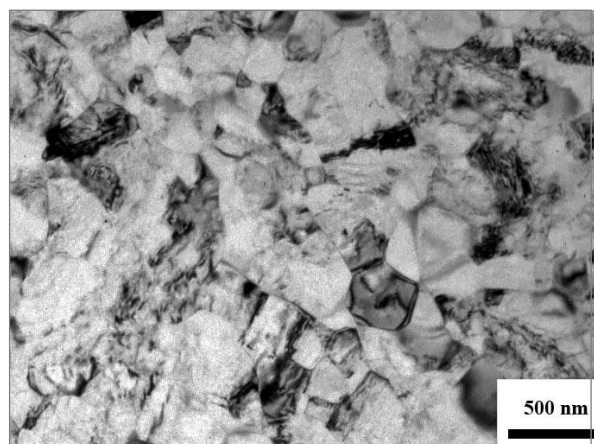


Рис. 5. Образец, обработанный БУФО в различных режимах
Fig. 5. Sample processed under various AFUF modes



a



b

Рис. 6. Микроструктура титана марки Grade 4 после 6 циклов РКВП-Конформ и волочения до \varnothing 12 мм ($\epsilon=0,15$):
a – РЭМ; *b* – ПЭМ

Fig. 6. Grade 4 titanium microstructure after six ECAP-Conform cycles and drawing to \varnothing 12 mm ($\epsilon=0,15$):
a – SEM; *b* – TEM

происходит наложение ударов друг на друга, что ведет к образованию более высоких микронеровностей, чем в случае небольшой амплитуды. О таком влиянии скорости вращения свидетельствует проведенный далее эксперимент, который показал, что с увеличением скорости вращения параметр шероховатости имеет тенденцию к снижению. Так, при увеличении скорости вращения с 500 до 1600 об/мин при прочих равных ус-

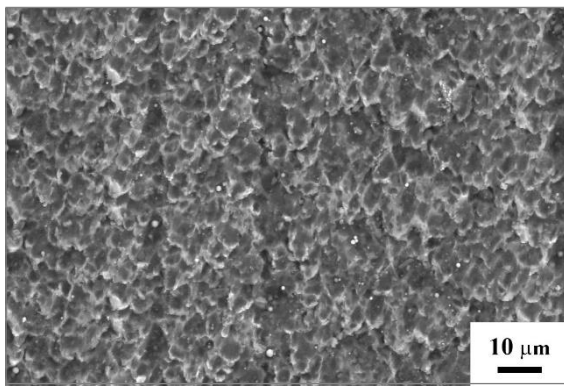
ловиях значение параметра шероховатости Ra снизилось с 0,42 до 0,36, а микротвердость при этом увеличивалась.

Влияние предварительной обработки поверхности шлифованием на ее микротвердость и шероховатость неоднозначно. Для шероховатости разницы между шлифованными и нешлифованными образцами не наблюдается. Микротвердость образца после реза

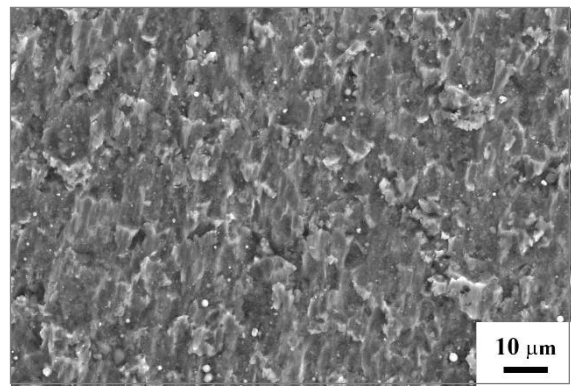
Таблица 1. Режимы БУФО и значения микротвердости и шероховатости Ra
Table 1. AFUF modes and values of microhardness and roughness Ra

Режим, №	Сила прижатия P, Н	Мощность, %	Частота вращения, об/мин	Шлифование, маркировка шлифовальной бумаги	Микротвердость HV0,01/15, МПа	Шероховатость Ra, мкм
И. с.				Точение	2590	8,59
1	25	100	1000	P1000	5190	0,25
2	50	100	1000	P1000	7775	0,38
3	100	100	1000	P1000	6280	0,31
4	50	50	1000	P1000	5730	0,29
5	50	75	1000	P1000	6830	0,28
2	50	100	1000	P1000	7775	0,38
6	50	100	500	P1000	5490	0,42
2	50	100	1000	P1000	7775	0,38
7	50	100	1600	P1000	8930	0,36
8	50	100	1000	Точение	8230	0,42
9	50	100	1000	P600	6310	0,42
2	50	100	1000	P1000	7775	0,38

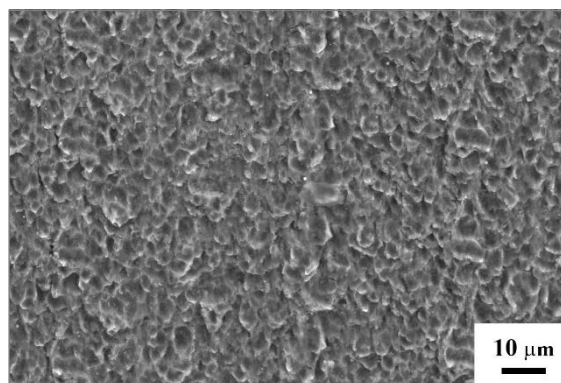
Примечание: И. с. – исходное состояние.



a



b



c

Рис. 7. Изображение поверхности упрочненного слоя (PЭМ), полученного по режимам: a – № 2; b – № 7; c – № 8
Fig. 7. An image of a hardened layer surface (SEM) obtained by the modes: a – No. 2; b – No. 7; c – No. 8

и после шлифования наждачной бумагой P1000 практически равна, а после наждачной бумаги P600 – ниже примерно на 2000 МПа.

Исследование микроструктуры поверхности образцов с максимальными значениями микротвердости (полученной по режимам № 2, 7 и 8) методом РЭМ (рис. 7) позволило установить, что обработка по предложенным режимам ведет к формированию поверхности в виде фрагментов с размером от 3 до 5 мкм. При этом в состоянии с максимальной микротвердостью (режим № 7) фрагменты имеют более вытянутую форму, что может объясняться более высокой скоростью вращения заготовки.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В рамках проведенного исследования изучено влияние технологических параметров БУФО на шероховатость и микротвердость образцов из технически чистого титана марки Grade 4 в УМЗ состоянии.

Установлено, что обработка технически чистого титана в УМЗ состоянии методом БУФО приводит к существенному повышению микротвердости поверхности от 2 до 3,5 раз и снижению ее шероховатости. Максимальное значение микротвердости достигает 8930 ± 70 МПа и наблюдается в режиме № 7. Минимальная шероховатость наблюдается в режиме № 1 и составляет $Ra=0,25$.

Выявлено, что увеличение мощности ведет к линейному увеличению микротвердости, при этом параметр шероховатости в выбранных режимах становится больше. С увеличением скорости вращения заготовки параметр шероховатости имеет тенденцию к снижению, а микротвердость при этом возрастает.

Исследование микроструктуры поверхностного слоя образцов позволило установить, что обработка по предложенным режимам ведет к формированию поверхности в виде фрагментов размером от 3 до 5 мкм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Kang J.-H., Ko Y.G. Microstructure and mechanical properties of ultrafine grained 5052 Al alloy fabricated by multi-pass differential speed rolling // *Journal of Materials Research and Technology*. 2022. Vol. 19. P. 2031–2049. DOI: [10.1016/j.jmrt.2022.05.196](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.05.196).
- Mao Q., Liu Ya., Zhao Y. A review on mechanical properties and microstructure of ultrafine grained metals and alloys processed by rotary swaging // *Journal of Alloys and Compounds*. 2022. Vol. 896. Article number 163122. DOI: [10.1016/j.jallcom.2021.163122](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.163122).
- Naseri R., Hiradfar H., Shariati M., Kadkhodayan M. A comparison of axial fatigue strength of coarse and ultrafine grain commercially pure titanium produced by ECAP // *Archives of Civil and Mechanical Engineering*. 2018. Vol. 18. № 3. P. 755–767. DOI: [10.1016/j.acme.2017.12.005](https://doi.org/10.1016/j.acme.2017.12.005).
- Valiev R.Z., Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Bulk nanostructured materials: Fundamentals and applications. New Jersey: Wiley, 2013. 440 P. DOI: [10.1002/9781118742679](https://doi.org/10.1002/9781118742679).
- Stolyarov V.V., Valiev R.Z., Zhu Y.T., Lowe T.C. Microstructure and properties of pure Ti processed by ECAP and cold extrusion // *Materials Science and Engineering: A*. 2001. Vol. 303. № 1-2. P. 82–89. DOI: [10.1016/S0921-5093\(00\)01884-0](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(00)01884-0).
- Raab G.I., Valiev R.Z., Gunderov D.V., Lowe T.C., Misra A., Zhu Y.T. Long-length ultrafine-grained titanium rods produced by ECAP- conform // *Materials Science Forum*. 2008. Vol. 584-586 PART 1. P. 80–85. DOI: [10.4028/www.scientific.net/msf.584-586.80](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/msf.584-586.80).
- Fintová S., Arzaghi M., Kuběna I., Kunz L., Sarrazin-Baudoux C. Fatigue crack propagation in UFG Ti grade 4 processed by severe plastic deformation // *International Journal of Fatigue*. 2017. Vol. 98. P. 187–194. DOI: [10.1016/j.ijfatigue.2017.01.028](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2017.01.028).
- Жернаков В.С., Семенова И.П., Ермоленко А.Н. Влияние наряду деформированного состояния деталей из объемных наноматериалов на усталостную прочность // *Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета*. 2009. Т. 12. № 2. С. 62–68. EDN: [KXGYON](https://www.edn.ru/kxgyon).
- Урядов С.А. Повышение сопротивления усталости деталей технологическими методами // *Известия МГТУ МАМИ*. 2014. Т. 2. № 1. С. 176–179. EDN: [SMMVKL](https://www.edn.ru/smmvkl).
- Федчишин О.В., Трофимов В.В., Клименов В.А. Влияние ультразвуковой обработки на структуру и Физико-механические свойства титана BT 1-0 // *Сибирский медицинский журнал (Иркутск)*. 2009. Т. 89. № 6. С. 189–192. EDN: [JVYAVF](https://www.edn.ru/jvyavf).
- Zhang H., Chiang R., Qin H.F., Ren Z.C., Hou X.N., Lin D., Doll G.L., Vasudevan V.K., Dong Y.L., Ye C. The effects of ultrasonic nanocrystal surface modification on the fatigue performance of 3D-printed Ti64 // *International Journal of Fatigue*. 2017. Vol. 103. P. 136–146. DOI: [10.1016/j.ijfatigue.2017.05.019](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2017.05.019).
- Liu J., Ren Z., Dong Y., Ye C., Suslov S. Microstructure evolution in Ti64 subjected to laser-assisted ultrasonic nanocrystal surface modification // *International Journal of Machine Tools and Manufacture*. 2019. Vol. 136. P. 19–33. DOI: [10.1016/j.ijmactools.2018.09.005](https://doi.org/10.1016/j.ijmactools.2018.09.005).
- Холопов Ю.В. Безабразивная ультразвуковая финишная обработка металлов – технология XXI века // *Металлообработка*. 2001. № 4. С. 16–20. EDN: [IAFOAR](https://www.edn.ru/iafoar).
- Александров М.К., Папшева Н.Д., Акушская О.М. Ультразвуковое упрочнение деталей ГТД // *Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета им. Академика С.П. Королёва (Национального исследовательского университета)*. 2011. № 3-1. С. 271–276. EDN: [OWXWDZ](https://www.edn.ru/owxwdz).
- Козлов Э.В., Громов В.Е., Коваленко В.В., Попова Н.А. Градиентные структуры в перлитной стали. Новокузнецк: СибГИУ, 2004. 200 с.
- Иванов Ю.Ф., Ефимов О.Ю., Попова Н.А., Коваленко В.В., Коновалов С.В., Громов В.Е., Козлов Э.В. Формирование градиентных структурно-фазовых состояний на наномасштабном уровне в прокатных валах // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2008. Т. 5. № 4. С. 55–58. EDN: [KTMLNJ](https://www.edn.ru/ktmlnj).
- Lu K. Making strong nanomaterials ductile with gradients: Microstructures that increase metal crystallite size from nanoscale with surface depth are both strong and

- ductile // *Science*. 2014. Vol. 345. № 6203. P. 1455–1456. DOI: [10.1126/science.1255940](https://doi.org/10.1126/science.1255940).
18. Müller M., Lebedev A., Svobodová J., Náprsková N., Lebedev P. Abrasive-free ultrasonic finishing of metals // *Manufacturing technology*. 2014. Vol. 14. № 3. P. 366–370.
 19. Aleš Z., Pavlů J., Hromasová M., Svobodová J. Tribological properties of brass surfaces machined by abrasive - free ultrasonic finishing process // *Manufacturing technology*. 2019. Vol. 19. № 1. P. 3–8. DOI: [10.21062/UJEP/235.2019/A/1213-2489/MT/19/1/3](https://doi.org/10.21062/UJEP/235.2019/A/1213-2489/MT/19/1/3).
 20. Клименов В.А., Ковалевская Ж.Г., Каминский П.П., Шаркеев Ю.П., Лотков А.И. Ультразвуковая поверхностная обработка – перспективный способ повышения ресурса работы деталей железнодорожного транспорта // *Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля*. 2010. Т. 152. № 10. С. 117–121.
 21. Богуслав В.А., Вишнепольский Е.В., Пухальская Г.В., Гликсон И.Л. Повышение сопротивления усталости тонкостенных валов // *Вісник двигунобудування*. 2007. № 2. С. 136–141.
- ### REFERENCES
1. Kang J.-H., Ko Y.G. Microstructure and mechanical properties of ultrafine grained 5052 Al alloy fabricated by multi-pass differential speed rolling. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, Vol. 19, pp. 2031–2049. DOI: [10.1016/j.jmrt.2022.05.196](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.05.196).
 2. Mao Q., Liu Ya., Zhao Y. A review on mechanical properties and microstructure of ultrafine grained metals and alloys processed by rotary swaging. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, Vol. 896, article number 163122. DOI: [10.1016/j.jallcom.2021.163122](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.163122).
 3. Naseri R., Hiradfar H., Shariati M., Kadkhodayan M. A comparison of axial fatigue strength of coarse and ultrafine grain commercially pure titanium produced by ECAP. *Archives of Civil and Mechanical Engineering*, 2018, Vol. 18, no. 3, pp. 755–767. DOI: [10.1016/j.acme.2017.12.005](https://doi.org/10.1016/j.acme.2017.12.005).
 4. Valiev R.Z., Zhilyaev A.P., Langdon T.G. *Bulk nanostructured materials: Fundamentals and applications*. New Jersey, Wiley Publ., 2013. 440 P. DOI: [10.1002/9781118742679](https://doi.org/10.1002/9781118742679).
 5. Stolyarov V.V., Valiev R.Z., Zhu Y.T., Lowe T.C. Microstructure and properties of pure Ti processed by ECAP and cold extrusion. *Materials Science and Engineering: A*, 2001, Vol. 303, no. 1-2, pp. 82–89. DOI: [10.1016/S0921-5093\(00\)01884-0](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(00)01884-0).
 6. Raab G.I., Valiev R.Z., Gunderov D.V., Lowe T.C., Misra A., Zhu Y.T. Long-length ultrafine-grained titanium rods produced by ECAP-conform. *Materials Science Forum*, 2008, Vol. 584-586 PART 1, pp. 80–85. DOI: [10.4028/www.scientific.net/msf.584-586.80](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/msf.584-586.80).
 7. Fintová S., Arzaghi M., Kuběna I., Kunz L., Sarrazin-Baudoux C. Fatigue crack propagation in UFG Ti grade 4 processed by severe plastic deformation. *International Journal of Fatigue*, 2017, Vol. 98, pp. 187–194. DOI: [10.1016/j.ijfatigue.2017.01.028](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2017.01.028).
 8. Zhernakov V.S., Semenova I.P., Ermolenko A.N. Influence of the stress strain behavior condition of details from volume nanomaterials on fatigue strength. *Vestnik Ufimskogo gosudarstvennogo aviatsionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2009, Vol. 12, no. 2, pp. 62–68. EDN: [KXGYOH](https://elibrary.ru/xkgyoh).
 9. Uryadov S.A. Improvement of fatigue resistance of parts using technological methods. *Izvestiya MGTU MAMI*, 2014, Vol. 2, no. 1, pp. 176–179. EDN: [SMMVKL](https://elibrary.ru/smmvkl).
 10. Fedchishin O.V., Trofimov V.V., Klimenov V.A. Influence of ultrasonic processing on structure and physicomechanical properties of titan BT 1-0. *Sibirskiy meditsinskiy zhurnal (Irkutsk)*, 2009, Vol. 89, no. 6, pp. 189–192. EDN: [JVYAVE](https://elibrary.ru/jvyave).
 11. Zhang H., Chiang R., Qin H.F., Ren Z.C., Hou X.N., Lin D., Doll G.L., Vasudevan V.K., Dong Y.L., Ye C. The effects of ultrasonic nanocrystal surface modification on the fatigue performance of 3D-printed Ti64. *International Journal of Fatigue*, 2017, Vol. 103, pp. 136–146. DOI: [10.1016/j.ijfatigue.2017.05.019](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2017.05.019).
 12. Liu J., Ren Z., Dong Y., Ye C., Suslov S. Microstructure evolution in Ti64 subjected to laser-assisted ultrasonic nanocrystal surface modification. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2019, Vol. 136, pp. 19–33. DOI: [10.1016/j.ijmactools.2018.09.005](https://doi.org/10.1016/j.ijmactools.2018.09.005).
 13. Kholopov Yu.V. Abrasive-free ultrasonic finishing of metals – the technology of the XXI century. *Metallo-obrabotka*, 2001, no. 4, pp. 16–20. EDN: [IAFOAR](https://elibrary.ru/iafoar).
 14. Aleksandrov M.K., Papsheva N.D., Akushskaya O.M. Ultrasonic hardening of parts GTE. *Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta im. Akademika S.P. Koroleva (Natsionalnogo issledovatel'skogo universiteta)*, 2011, no. 3-1, pp. 271–276. EDN: [OWXWDZ](https://elibrary.ru/owxwdz).
 15. Kozlov E.V., Gromov V.E., Kovalenko V.V., Popova N.A. *Gradientnye struktury v perlitnoy stali* [Gradient structures in pearlitic steel]. Novokuznetsk, SibGIU Publ., 2004. 200 p.
 16. Ivanov Yu.F., Efimov O.Yu., Popova N.A., Kovalenko V.V., Konovalov S.V., Gromov V.E., Kozlov E.V. Formation of Gradient Structural-Phase States at the Nanoscale Level in Rolls. *Fundamentalnye problemy sovremennogo materialovedeniya*, 2008, Vol. 5, no. 4, pp. 55–58. EDN: [KTMLNJ](https://elibrary.ru/ktmlnj).
 17. Lu K. Making strong nanomaterials ductile with gradients: Microstructures that increase metal crystallite size from nanoscale with surface depth are both strong and ductile. *Science*, 2014, Vol. 345, no. 6203, pp. 1455–1456. DOI: [10.1126/science.1255940](https://doi.org/10.1126/science.1255940).
 18. Müller M., Lebedev A., Svobodová J., Náprsková N., Lebedev P. Abrasive-free ultrasonic finishing of metals. *Manufacturing technology*, 2014, Vol. 14, no. 3, pp. 366–370.
 19. Aleš Z., Pavlů J., Hromasová M., Svobodová J. Tribological properties of brass surfaces machined by abrasive - free ultrasonic finishing process. *Manufacturing technology*, 2019, Vol. 19, no. 1, pp. 3–8. DOI: [10.21062/UJEP/235.2019/A/1213-2489/MT/19/1/3](https://doi.org/10.21062/UJEP/235.2019/A/1213-2489/MT/19/1/3).
 20. Klimenov V.A., Kovalevskaya Zh.G., Kaminskiy P.P., Sharkeev Yu.P., Lotkov A.I. Ultrasonic surface treatment – a promising way to increase the service life of railway transport parts. *Visnik Skhidnoukrajn'skogo natsionalnogo universitetu imeni Volodimira Dalya*, 2010, Vol. 152, no. 10, pp. 117–121.

21. Boguslaev V.A., Vishnepolskiy E.V., Pukhalskaya G.V., Glikson I.L. Increasing the fatigue resistance of thin-walled shafts. *Visnik dvigunobuduvannya*, 2007, no. 2, pp. 136–141.

Roughness and microhardness of UFG Grade 4 titanium under abrasive-free ultrasonic finishing

© 2022

Rashid N. Asfandiyarov*^{1,2,4}, PhD (Engineering), researcher, assistant professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals
Georgy I. Raab³, Doctor of Sciences (Engineering), leading researcher
Dmitry V. Gunderov^{1,2,5}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), leading researcher of the Institute of Physics of Molecules and Crystals, professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals
Denis A. Aksenov^{1,2,6}, junior researcher
Arseniy G. Raab², PhD (Engineering), researcher
Sofia D. Gunderova², student
Mariya A. Shishkunova², graduate student

¹*Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa (Russia)*

²*Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)*

³*Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk (Russia)*

*E-mail: a.r.n@list.ru

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5522-4314>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5925-4513>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2652-2646>

Received 28.04.2022

Accepted 16.08.2022

Abstract: Increasing the fatigue resistance of implants is an important scientific and technical problem. One of the solutions to this problem is the high-strength state formation due to the ultrafine-grained (UFG) structure. However, high-strength alloys are characterized by greater sensitivity to stress concentrators and the surface roughness parameter. In turn, implant designs, as a rule, imply the presence of concentrators in the form of various grooves, threaded elements, etc., and the manufacturing technology supposes mechanical processing with an ambiguous effect on a finished product surface. The application of additional surface finishing, for example, abrasive-free ultrasonic finishing (AFUF), is a solution to this problem. This work aims to study the effect of different AFUF modes on the microhardness and roughness of a cylindrical blank made of Grade 4 commercially pure titanium in the UFG state. During the study, the authors assessed the effect of the rotation frequency of a workpiece and the static force of pressing the tool against the processed workpiece on the surface parameters; carried out microstructural studies of the obtained samples. The results showed that processing titanium in the UFG state by the AFUF method leads to a significant increase in the surface microhardness and a decrease in its roughness. For example, depending on the mode, the increase in microhardness can reach from 2 to 3.5 times. The authors investigated the effect of a power level of ultrasonic treatment on roughness and microhardness and considered various variants of surface pretreatment. The study identified that an increase in the speed of rotation of a workpiece reduces the roughness of a machined workpiece, while the microhardness increases.

Keywords: abrasive-free ultrasonic finishing; UFG; Grade 4 titanium ultrafine-grained structure; roughness; microhardness.

Acknowledgements: The study was supported by the grant No. 21-79-00124 of the Russian Science Foundation, <https://rscf.ru/project/21-79-00124/>.

For citation: Asfandiyarov R.N., Raab G.I., Gunderov D.V., Aksenov D.A., Raab A.G., Gunderova S.D., Shishkunova M.A. Roughness and microhardness of UFG Grade 4 titanium under abrasive-free ultrasonic finishing. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 41–49. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-41-49.

Исследование влияния параметров режима сварки трением с перемешиванием меди на механические свойства и электропроводность сварных соединений

© 2022

Атрощенко Валерий Владимирович^{1,3}, доктор технических наук, заведующий кафедрой современных методов сварки и контроля конструкций
Селиванов Алексей Сергеевич^{*2,4}, кандидат технических наук, начальник научно-технического отдела
Лобачев Владислав Сергеевич^{2,5}, инженер научно-технического отдела
Логачев Юрий Владимирович^{1,6}, магистрант
Садрисламов Артем Радифович^{1,7}, магистрант

¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

²ООО «Аттестационный центр СваркаТехСервис», Уфа (Россия)

*E-mail: selivanov@naks-rb.ru

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7145-7532>

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9631-2102>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0615-5401>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4575-9670>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9528-3266>

Поступила в редакцию 27.04.2022

Принята к публикации 27.07.2022

Аннотация: Медь находит широкое применение при изготовлении токоведущих деталей, в основном электротехнических шин силового оборудования. Сварка меди традиционными способами осложняется высокой теплопроводностью, жидкотекучестью, значительным окислением при температуре плавления и склонностью к образованию трещин. Одним из путей решения проблем, возникающих при сварке меди, является применение способов сварки в твердой фазе, ярким представителем которых является сварка трением с перемешиванием (СТП). В работе проведены экспериментальные исследования влияния формы рабочей части инструмента и параметров режима сварки: скорости сварки, частоты вращения инструмента и угла наклона инструмента – на возможность возникновения дефектов в сварных соединениях пластин из меди марки М1 толщиной 5 мм, выполненных СТП. Приведены результаты механических испытаний на статическое растяжение и изгиб сварных соединений с туннельным дефектом и без него. Сварные соединения с туннельным дефектом показали снижение уровня механических свойств: величина временного сопротивления при растяжении ниже на 33 %, а относительного удлинения – на 8 %, чем у соединений без дефектов. Указан ряд факторов, влияющих на вероятность возникновения дефектов при СТП: скорость сварки, частота вращения инструмента, конструкция рабочей части инструмента, угол наклона инструмента, сила и глубина погружения, смещение пина, толщина заготовки и условия закрепления. Установлено, что применение инструмента с конической формой заплечика с вогнутой поверхностью позволяет получить сварные соединения без наружных и внутренних дефектов. На основании данных, полученных в ходе экспериментальных исследований, были определены режимы сварки, позволяющие получать сварные соединения с величиной электрического сопротивления на уровне основного металла: частота вращения инструмента – 1250 об/мин, скорость сварки – 25 мм/мин, глубина погружения инструмента – не менее 0,41 мм.

Ключевые слова: СТП; сварка трением с перемешиванием; сварка меди; сварное соединение; механические свойства; электропроводность.

Для цитирования: Атрощенко В.В., Селиванов А.С., Лобачев В.С., Логачев Ю.В., Садрисламов А.Р. Исследование влияния параметров режима сварки трением с перемешиванием меди на механические свойства и электропроводность сварных соединений // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 50–60. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-50-60.

ВВЕДЕНИЕ

Медь, благодаря высокой электро- и теплопроводности, пластичности, а также коррозионной стойкости, находит широкое применение при изготовлении токоведущих деталей, в основном электротехнических шин силового оборудования. Сварка меди традиционными способами осложняется высокой теплопроводностью, жидкотекучестью, значительным окислением при температуре плавления и склонностью к образованию трещин.

Одним из путей решения проблем, возникающих при сварке меди, является применение способов сварки в твердой фазе, ярким представителем которых является сварка трением с перемешиванием (СТП). К преимуществам СТП относят возможность получения сварных соединений с мелкозернистой структурой и малыми остаточными деформациями, сварки неметаллических, полимерных, композитных и разнородных материалов [1–3]. Основной недостаток данного процесса связан с высокой стоимостью оборудования, а также необходимостью обеспечения значительных

усилий для закрепления заготовок и высокоточного контроля и управления режимами сварки [4–6].

Технология СТП основана на возможности формирования сварного соединения за счет тепловой энергии, возникающей в результате сил трения инструмента и соединяемых заготовок [7]. В процессе сварки вращающийся инструмент полностью погружается в заготовку и обеспечивает осевое сжимающее усилие на зону перемешивания. Взаимодействие между инструментом и поверхностями заготовки создает большое количество тепла за счет трения, приводящее материал заготовок в вязко-текучее состояние, что обеспечивает равномерное обтекание пина инструмента. Происходит перемешивание материалов заготовок, и образуется требуемый сварной шов [8–10]. Схема процесса показана на рис. 1.

Параметры режима СТП оказывают существенное влияние на механические свойства сварных соединений меди. Исследование влияния скорости сварки на механические свойства соединений при сварке медных пластин толщиной 3 мм выполнялось при частоте вращения инструмента 600 об/мин на различных скоростях сварки в диапазоне от 25 до 200 мм/мин. С увеличением скорости сварки предел прочности на растяжение и относительное удлинение соединений сначала увеличивались, а затем уменьшались, при этом скорость сварки в диапазоне 25–150 мм/мин практически не влияла на свойства соединений. Разрушение соединений, полученных при указанных скоростях сварки, происходило по зонам термомеханического и термического влияния, а также по основному металлу [11; 12].

На оптимальных режимах сварки предел прочности при растяжении достигает 90 % прочности основного материала [2]. Важным показателем качества процесса СТП является температура в зоне сварки. В ходе экспериментальных исследований распределения температуры при сварке медных заготовок толщиной 3,1 мм установлено, что температура в зоне сварки для качественного формирования сварного соединения должна находиться в диапазоне от 460 до 530 °С. При этом из-

меряемая температура на стороне набегания оказалась несколько выше, чем на стороне отхода. По результатам механических испытаний прочность на растяжение и твердость сварного соединения составили около 60 % от основного металла. При поддержании температуры в указанном диапазоне в процессе сварки величина относительного удлинения сварных образцов может превышать аналогичный параметр основного металла в 3 раза [13].

Кроме режимов сварки на механические свойства соединений оказывают влияние условия теплоотвода от свариваемых заготовок. Для сравнения микроструктуры и механических свойств соединений, полученных с водяным охлаждением и без него, выполнялась сварка медных пластин толщиной 2 мм при частоте вращения инструмента 1600 об/мин и скоростях перемещения 50 и 100 мм/мин. При более низких частотах вращения и более высоких скоростях перемещения наблюдались туннельные дефекты и пустоты из-за недостаточных тепловыделения и скорости течения пластифицированного материала. При этом сварка с водяным охлаждением позволила получить более мелкую микроструктуру с увеличением показателей прочности и относительного удлинения. Механические свойства сварных соединений оказались выше, чем у основного металла, в отличие от соединений, полученных на воздухе при тех же параметрах режима [14].

В таблице 1 приведены рекомендуемые режимы СТП меди для соединений в диапазоне толщин от 2 до 6 мм [15]. При этом в литературных данных отсутствует информация о таких значимых параметрах, как глубина погружения и угол наклона инструмента. Кроме того, геометрические параметры инструмента также влияют на механические свойства сварных соединений меди. Установлено, что форма пина инструмента оказывает наибольшее влияние на течение пластифицированного материала, микроструктуру и механические свойства сварного шва. Результаты экспериментов показали, что надежные бездефектные соединения могут быть получены с использованием восьми различных

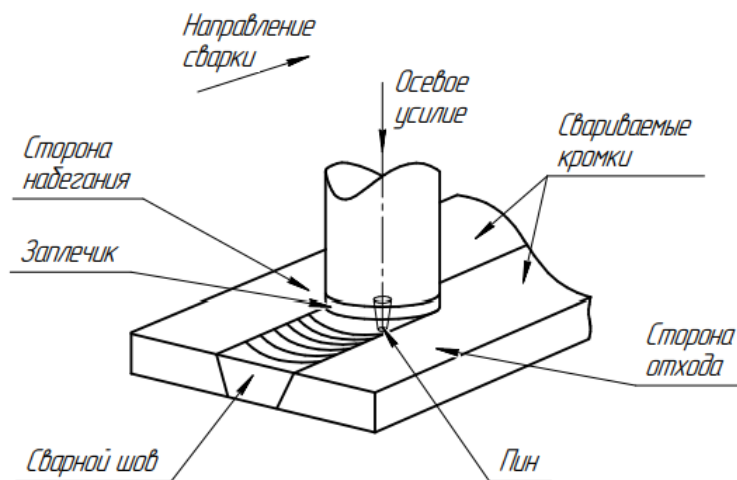


Рис. 1. Схема рабочего процесса сварки трением с перемешиванием
Fig. 1. The scheme of a working process of friction stir welding

Таблица 1. Рекомендуемые режимы сварки трением с перемешиванием меди [15]
 Table 1. Recommended FSW modes for copper [15]

Толщина свариваемых листов	Частота вращения инструмента, об/мин	Скорость сварки, мм/мин
2	1600	50, 100
2	400–1150	200–800
3	900	40
3	400	100
3	600	25–150
3,1	800	30
3,1	900	50
4	1250	61
5	600, 900	25, 75
6	635	19

форм пина: конического, цилиндрического, конического с резьбой, цилиндрического с резьбой, треугольного, квадратного, пятиугольного и шестиугольного. В зависимости от применяемой формы пина инструмента, показатели механических свойств сварных соединений колебались на уровне 65–85 % от показателей основного металла. Было обнаружено, что соединения, выполненные с использованием квадратного профиля пина инструмента, позволили получить лучшие механические свойства по сравнению с другими формами инструмента [16].

При сварке образцов из технической чистой меди толщиной 4 мм использовались следующие режимы: частота вращения инструмента – 1250 об/мин, скорость сварки – 61 мм/мин, угол наклона инструмента составлял 3° [17]. По результатам испытаний прочность соединений составила около 87 % от прочности основного металла. Исследование микроструктуры сварного шва дефектов не выявило, при этом структура сварного шва значительно отличалась от структуры основного металла. В центральной области сварного шва наблюдалась мелкая и равномерная структура. Размер зерен зоны перемешивания составил примерно 100 мкм, в зоне термического влияния – 230 мкм при размере зерен основного металла 210 мкм. В зоне сварного шва образовалась небольшая область разупрочнения из-за меньшей плотности дислокаций по сравнению с основным металлом. Твердость основного металла составила 105–110 HV. Твердость зоны сварного шва имела переменное значение от 60 до 90 HV [17].

Неправильно выбранные параметры инструмента и режимы СТП приводят к различным дефектам сварных соединений: микро- и макротрещинам, порам, туннелям и др. [18].

Цель работы – определение влияния параметров режимов сварки и формы инструмента на механические свойства и электропроводность меди при получении бездефектных сварных соединений.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для практической реализации СТП меди использовался модернизированный консольно-фрезерный станок (рис. 2) с мощностью привода шпинделя 12 кВт. Контроль перемещений свариваемых деталей относительно инструмента осуществлялся с использованием устройства цифровой индикации и цифровых оптических линеек с точностью 0,005 мм.

Образцы для сварки изготавливались из листов меди марки М1 толщиной 5 мм, устанавливались и закреплялись в специализированной сварочной оснастке для сварки стыковых соединений. Глубина погружения инструмента контролировалась по величине погружения заплечика в свариваемые заготовки.

Эксперименты проводились на различных режимах сварки, приведенных в таблице 2. Наряду с изменением частоты вращения инструмента и скорости сварки устанавливались различные значения глубины погружения и угла наклона инструмента.

Образцы контролировались на наличие внутренних дефектов методом цифровой радиографии на программно-аппаратном комплексе «Цифракон».

Определение механических свойств сварных соединений выполнялось на образцах, сваренных с применением вводных и выводных планок. Это позволило исключить влияние краевых эффектов на результаты исследования.

Для испытаний на статическое растяжение использовалась испытательная машина ИР 6055-500-0. Испытания на статический изгиб проводились на прессе для гидравлических испытаний ПИ модификации П-50. Образцы испытывались швом наружу и швом внутрь.

Испытания на электросопротивление проводились с использованием микрометра МИКО-21 для высокоточных измерений электрического сопротивления постоянному току.



Рис. 2. Модернизированный консольно-фрезерный станок
Fig. 2. Upgraded bracket milling machine

Таблица 2. Режимы сварки трением с перемешиванием меди
Table 2. FSW modes for copper

№ режима сварки	Частота вращения инструмента, об/мин	Скорость сварки, мм/мин	Глубина погружения, мм	Угол наклона инструмента, град.
1	900	40	0,31	1
2	900	40	0,305	2
3	900	40	0,315	3
4	1120	25	0,49	2
5	1120	25	0,415	2
6	1120	25	0,48	2

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 3 и 4 представлены сварные соединения, полученные на различных режимах сварки. При контроле образцов, выполненных на режимах № 1–4 (таблица 2), обнаружен туннельный дефект (рис. 5). Анализ дефектов, выявленных при исследовании макроструктуры сварных соединений, показал, что размер туннельного дефекта зависит от угла наклона инструмента (α). При угле наклона инструмента $\alpha=2^\circ$ наблюдается наименьший по величине туннельный дефект.

На снимке образца, полученного с применением инструмента с плоским заплечиком (рис. 4 с), видно присутствие туннельного дефекта. На образце, полученном с использованием инструмента с конической формой заплечика с вогнутой поверхностью (рис. 4 d), туннельный дефект отсутствует.

На рис. 6 представлены микрошлифы образца без туннельного дефекта. Видно наличие мелкозернистой структуры в зоне перемешивания. Полученные результаты показывают, что применение рекомендуемых в литературных источниках режимов сварки без учета формы применяемого инструмента приводит к образованию туннельного дефекта.

Форма рабочей части инструмента в значительной степени влияет на вероятность появления дефектов в сварном шве. Применение инструмента с плоской формой заплечика приводит к формированию туннельного дефекта во всей области исследуемых режимов сварки. При этом переход от плоского заплечика к заплечику конической формы с вогнутой поверхностью обеспечивает формирование соединения меди без макродефектов.



Рис. 3. Внешний вид образцов, полученных на режимах № 1–3
Fig. 3. Visual appearance of specimens produced at the modes No. 1–3

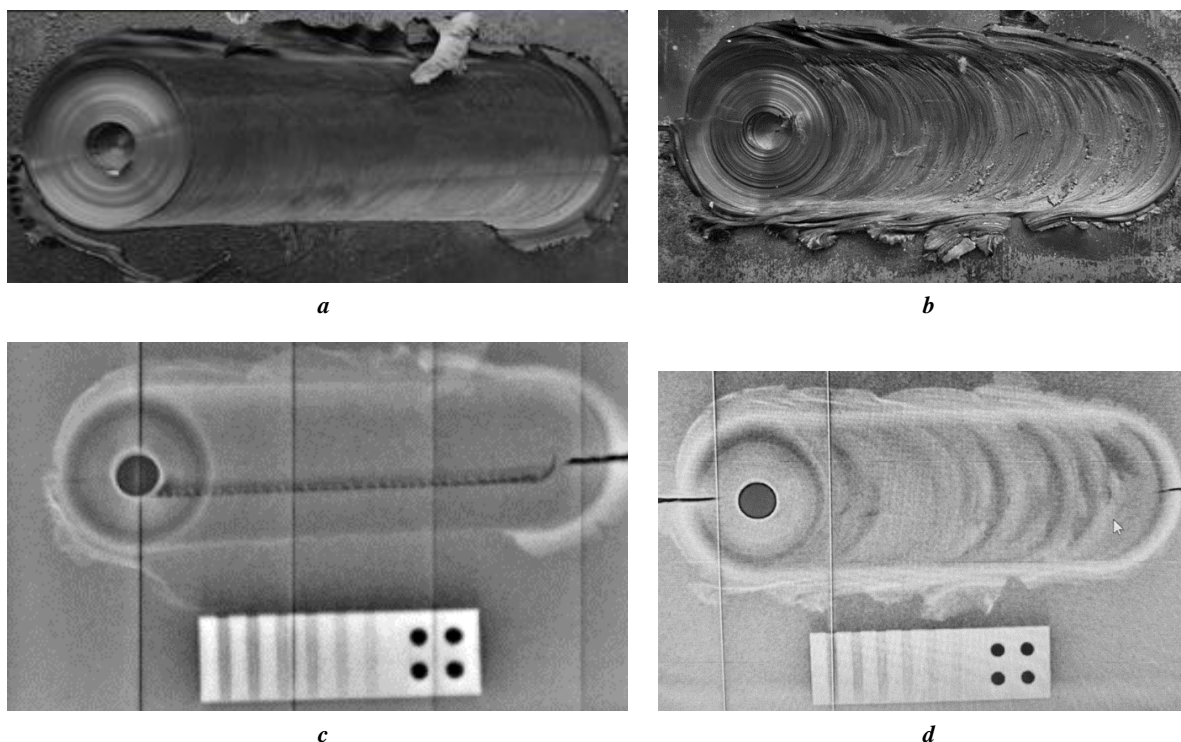


Рис. 4. Образцы, полученные на режимах № 4–5: **a, b** – внешний вид; **c, d** – цифровая радиография
Fig. 4. Specimens produced at the modes No. 4–5: **a, b** – visual appearance; **c, d** – digital radiography

С целью исключения краевых явлений образцы, используемые для проведения механических испытаний, изготавливались с применением вводных и выводных планок (рис. 7).

На рис. 8 показаны образцы после испытаний на статическое растяжение. Сравнение значений механических свойств сварных соединений и основного металла приведено в таблице 3.

На рис. 9 представлены образцы для испытаний на статический изгиб: на рис. 9 а, 9 б – сварной шов с туннельным дефектом, на рис. 9 с, 9 д – сварной шов без туннельного дефекта.

В ходе механических испытаний установлено, что величина временного сопротивления при растяжении образцов с туннельными дефектами ниже, чем у основного металла, на 24 %, а относительного удлинения – на 60 %.

При этом соединения без дефектов показали величину относительного удлинения выше, чем у основного металла, на 20 %, а величину временного сопротивления ниже на 17 %. Механические свойства сварного шва с туннельным дефектом значительно отличаются от свойств бездефектного сварного шва. Значение временного сопротивления при растяжении ниже на 33 %, а относительного удлинения – на 8 %, чем у шва без дефектов.

По результатам измерения электрического сопротивления сварного шва и зоны термического влияния среднее значение сопротивления составило 5,205 мкОм, а основного металла – 5,188 мкОм. Электрическое сопротивление не превышает 0,3 % сопротивления основного металла, что говорит о соответствии значений электропроводности основного металла и сварного соединения, полученного методом СТП.

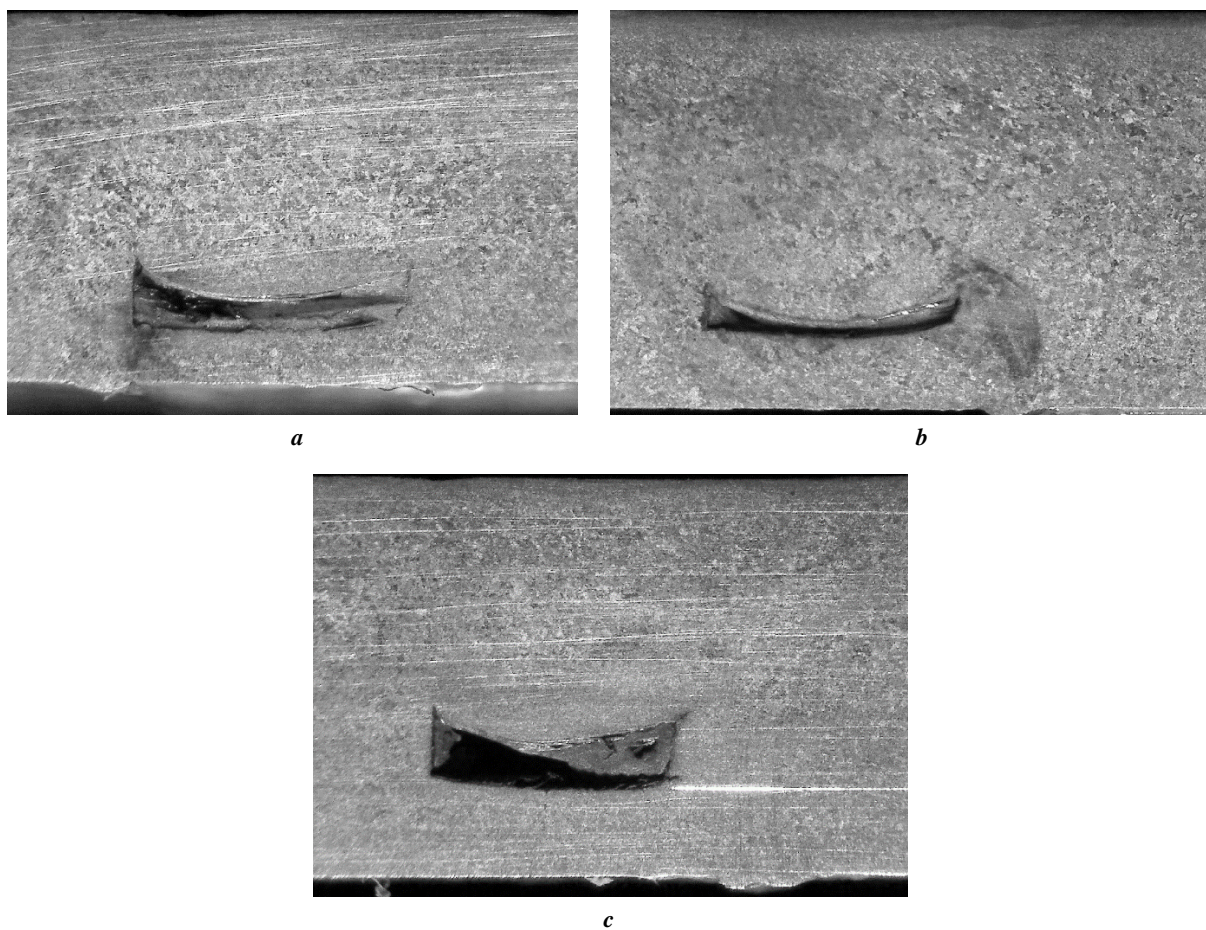


Рис. 5. Макрошлифы соединений при различных углах наклона инструмента:
a – $\alpha=1^\circ$; *b* – $\alpha=2^\circ$; *c* – $\alpha=3^\circ$
Fig. 5. Macrosections of joints at different dip angles of a tool:
a – $\alpha=1^\circ$; *b* – $\alpha=2^\circ$; *c* – $\alpha=3^\circ$

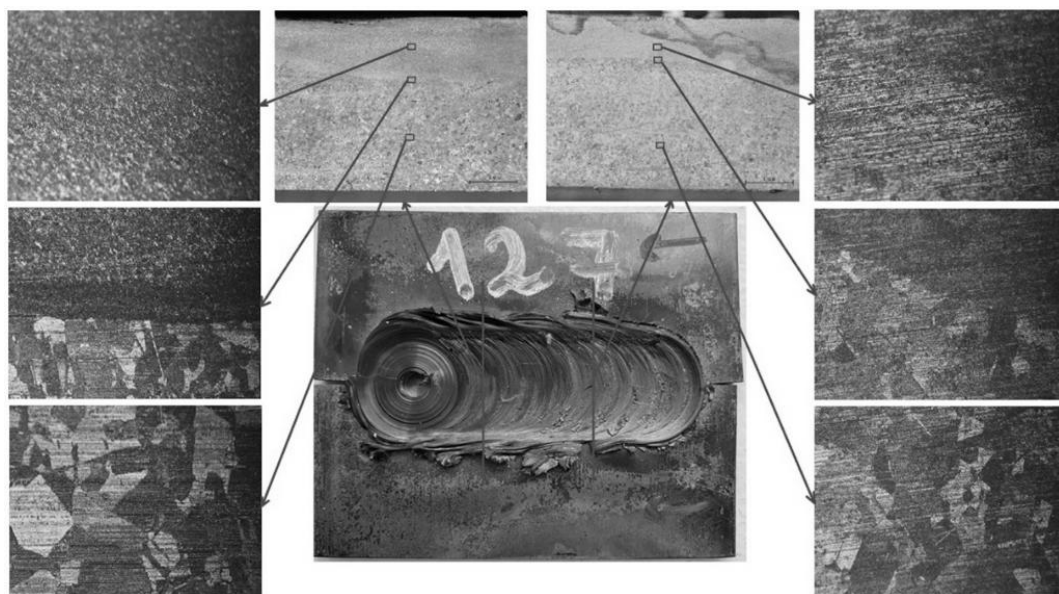


Рис. 6. Микрошлифы образца без туннельного дефекта
Fig. 6. Microslices of a specimen without a tunnel defect

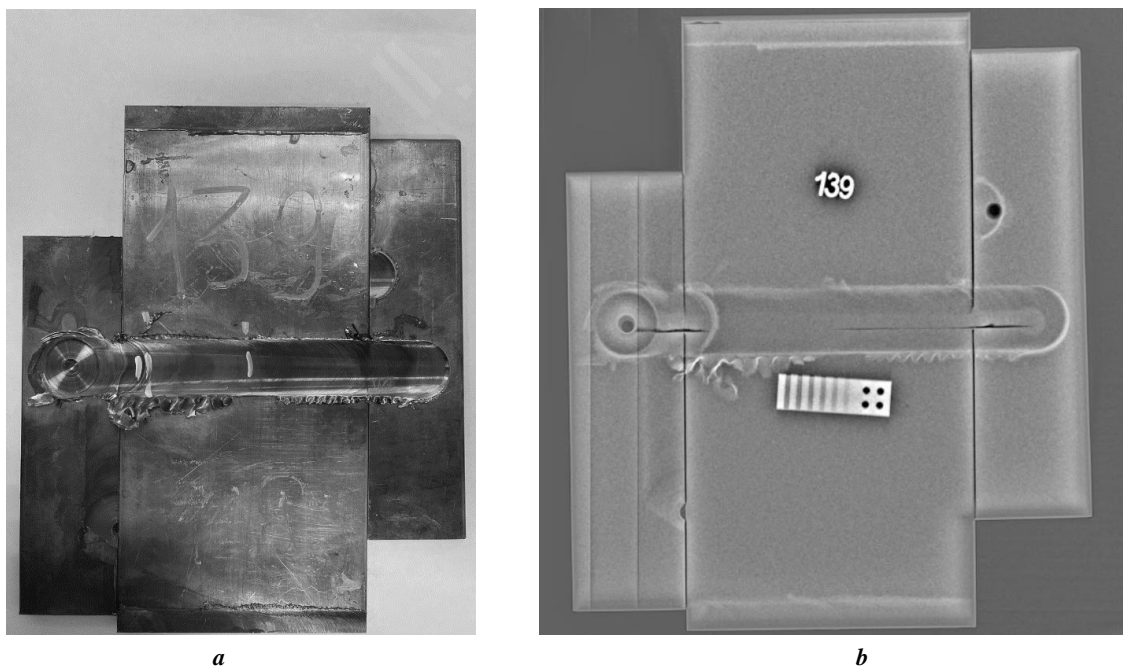


Рис. 7. Сварное соединение для механических испытаний: **a** – внешний вид; **b** – радиографический снимок
 Fig. 7. Welded joint for mechanical tests: **a** – visual appearance; **b** – radiograph

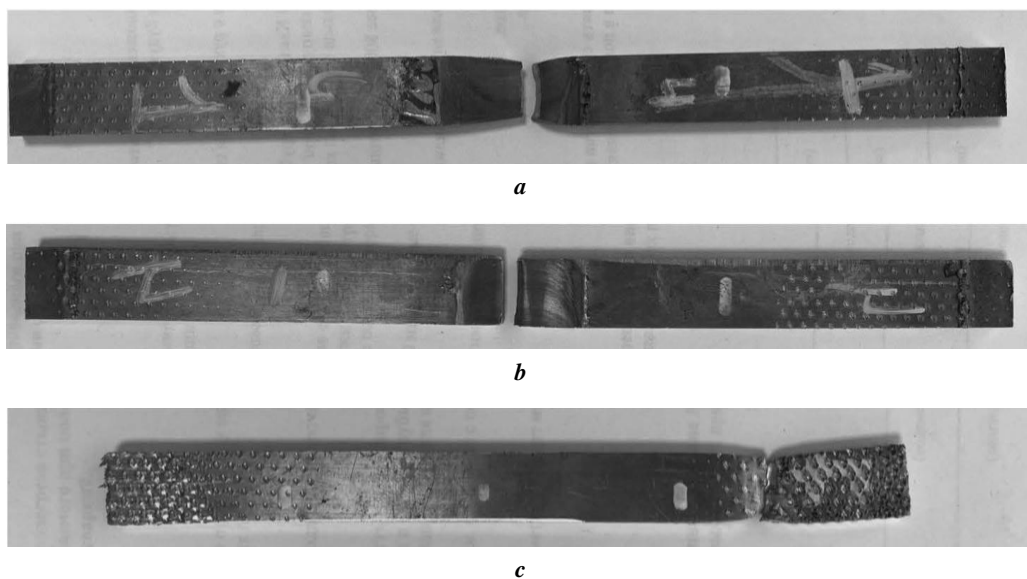


Рис. 8. Образцы после испытаний на статическое растяжение:
a – сварной шов без дефекта; **b** – сварной шов с дефектом; **c** – основной металл
 Fig. 8. Specimens after static tension tests:
a – welded joint without a defect; **b** – welded joint with a defect; **c** – parent metal

Таблица 3. Результаты механических испытаний
 Table 3. The results of mechanical tests

	σ_B , МПа	δ_{10} , %	Угол изгиба α
Сварной шов с дефектом	239,8	2,5	–
Сварной шов без дефекта	260	7,5	123°
Основной металл	313	6,25	–

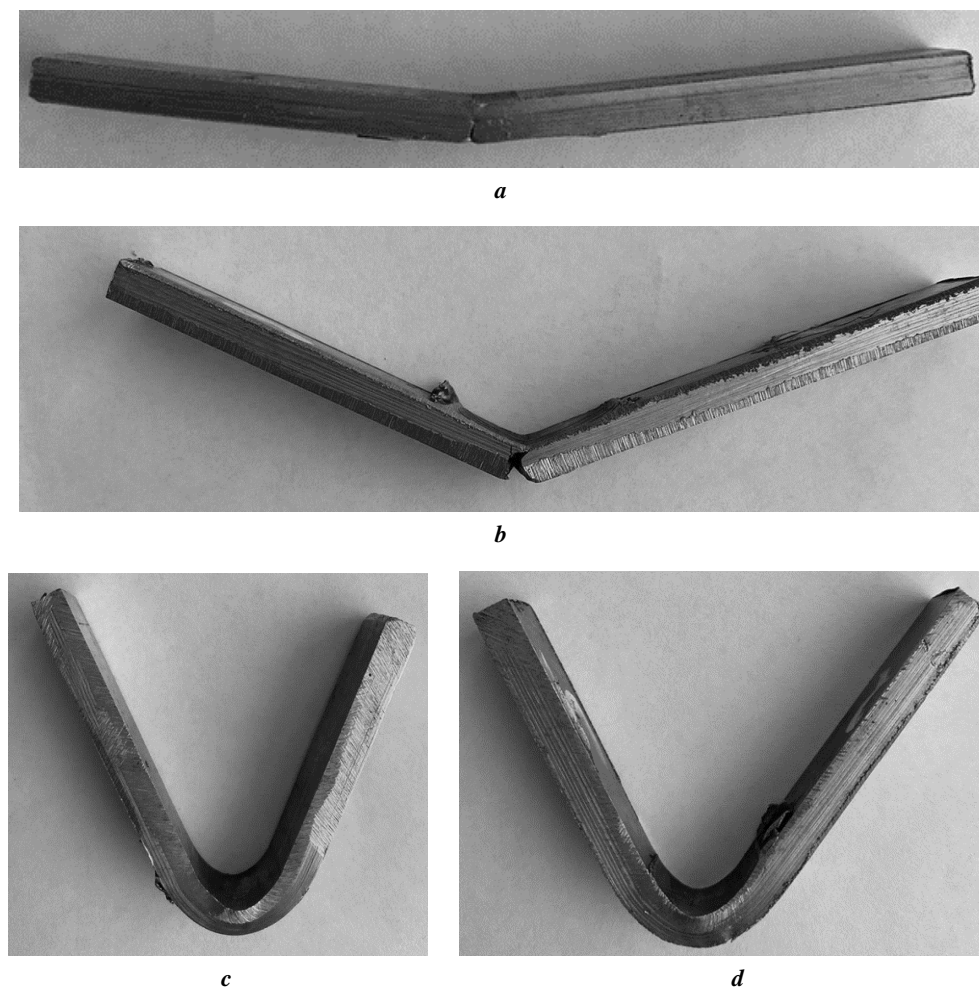


Рис. 9. Образцы после проведения испытаний на статический изгиб: *a, c* – швом наружу; *b, d* – швом внутрь
 Fig. 9. Specimens after static bending tests: *a, c* – seam out; *b, d* – seam in

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Образованию дефектов сварных соединений при СТП могут способствовать ряд важных факторов. К таким факторам относятся ошибочно выбранные параметры сварки: скорость сварки, частота вращения инструмента, конструкция рабочей части инструмента, угол наклона инструмента, сила и глубина погружения, смещение пина, толщина заготовки и условия закрепления. Таким образом, несоответствующие параметры сварки приводят к образованию пустот, туннелей и соединений с более низкой пластичностью, в то время как оптимальная скорость сварки, скорость движения инструмента и правильная конструкция инструмента обеспечивают более высокую прочность сварного соединения без дефектов. Более того, если в зоне перемешивания не выделяется достаточное количество тепла, это приводит к образованию таких дефектов, как туннель или полость [1; 3; 19; 20].

Образование туннельного дефекта на вводной и выводной планках, а также на начальном участке шва связано с недостаточной температурой свариваемых участков соединения [13], что обусловлено высокими теплопроводностью и теплоемкостью меди, а также значительными размерами свариваемых образцов для меха-

нических испытаний, по сравнению с образцами, свариваемыми ранее для поиска режимов сварки.

Результаты измерения электросопротивления показали, что отсутствие дефектов и мелкозернистая структура сварного соединения обеспечивают высокие значения электропроводности. Данный результат открывает широкие перспективы применения метода СТП для сварки электротехнических медных шин вместо широко используемых в настоящее время высокотратных болтовых соединений. Это обеспечит повышение надежности и снижение массогабаритных показателей выпускаемого силового оборудования.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Установлено, что применение инструмента с конической формой заплечика с вогнутой поверхностью для СТП меди позволяет получить сварные соединения без наружных и внутренних дефектов.

2. Механические свойства сварного соединения с туннельным дефектом значительно отличаются от бездефектного соединения. Значение временного сопротивления при растяжении ниже на 33 %, а относительного удлинения – на 8 %, чем у шва без дефектов.

3. Электропроводность сварного шва и околошов-ной зоны и основного металла отличаются незначи-тельно, увеличение электрического сопротивления не превышает 0,3 % относительно основного металла для образцов без туннельного дефекта.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Albannai A.I. Review the common defects in friction stir welding // *International journal of scientific and technology research*. 2020. Vol. 9. № 11. P. 318–329.
- Sahlot P., Singh A.K., Badheka V., Arora A. Friction stir welding of copper: numerical modeling and validation // *Transactions of the Indian Institute of Metals*. 2019. Vol. 72. № 5. P. 1339–1347. DOI: [10.1007/s12666-019-01629-9](https://doi.org/10.1007/s12666-019-01629-9).
- Singh V.P., Patel S.K., Ranjan A., Kuriachen B. Recent research progress in solid state friction-stir welding of aluminium-magnesium alloys: a critical review // *Journal of Materials Research and Technology*. 2020. Vol. 9. № 3. P. 6217–6256. DOI: [10.1016/j.jmrt.2020.01.008](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.01.008).
- Heidarzadeh A., Paidar M., Güleriyüz G., Vatankhah Barenji R. Application of nanoindentation to evaluate the hardness and yield strength of brass joints produced by FSW: microstructural and strengthening mechanisms // *Archives of Civil and Mechanical Engineering*. 2020. Vol. 20. № 2. Article number 41. DOI: [10.1007/s43452-020-00046-w](https://doi.org/10.1007/s43452-020-00046-w).
- Zhang H., Wang M., Zhu Z., Zhang X., Yu T., Yang G.X. Improving the structure-property of aluminum alloy friction stir weld by using a non-shoulderplunge welding tool // *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. 2016. Vol. 87. № 1-4. P. 1095–1104. DOI: [10.1007/s00170-016-8599-z](https://doi.org/10.1007/s00170-016-8599-z).
- Akinlabi E.T., Mahamood R.M. Introduction to Friction Welding, Friction Stir Welding and Friction Stir Processing // *Solid-State Welding: Friction and Friction Stir Welding Processes*. Springer, 2020. P. 1–12. DOI: [10.1007/978-3-030-37015-2_1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-37015-2_1).
- Zhang Y., Cao X., Larose S., Wanjara P. Review of tools for friction stir welding and processing // *Canadian Metallurgical Quarterly*. 2012. Vol. 51. № 3. P. 250–261. DOI: [10.1179/1879139512Y.0000000015](https://doi.org/10.1179/1879139512Y.0000000015).
- Rai R., De A., Bhadeshia H.K.D.H., DebRoy T. Review: Friction stir welding tools // *Science and Technology of Welding and Joining*. 2011. Vol. 16. № 4. P. 325–342. DOI: [10.1179/1362171811Y.0000000023](https://doi.org/10.1179/1362171811Y.0000000023).
- Mishra R.S., Ma Z.Y. Friction stir welding and processing // *Materials science and engineering*. 2005. Vol. 50. № 1-2. P. 1–78. DOI: [10.1016/j.mser.2005.07.001](https://doi.org/10.1016/j.mser.2005.07.001).
- Li X., Zhang Z., Peng Y., Yan D., Tan Z., Zhou Q., Wang K., Zhou M. Microstructure and mechanical properties of underwater friction stir welding of CNT/Al-Cu-Mg composites // *Journal of Materials Research and Technology*. 2022. Vol. 18. P. 405–415. DOI: [10.1016/j.jmrt.2022.02.089](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.02.089).
- Singh G., Thakur A., Singh S., Sharma N. Friction stir welding of copper: Processing and multi-objective optimization // *Indian Journal of Engineering and Materials Sciences*. 2020. Vol. 27. № 3. P. 709–716.
- Shen J.J., Liu H.J., Cui F. Effect of welding speed on microstructure and mechanical properties of friction stir welded copper // *Materials and Design*. 2010. Vol. 31. № 8. P. 3937–3942. DOI: [10.1016/j.matdes.2010.03.027](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2010.03.027).
- Hwang Y.M., Fan P.L., Lin C.H. Experimental study on Friction Stir Welding of copper metals // *Journal of Materials Processing Technology*. 2010. Vol. 210. № 12. P. 1667–1672. DOI: [10.1016/j.jmatprotec.2010.05.019](https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2010.05.019).
- Farrokhi H., Heidarzadeh A., Saeid T. Frictions stir welding of copper under different welding parameters and media // *Science and Technology of Welding and Joining*. 2013. Vol. 18. № 8. P. 697–702. DOI: [10.1179/1362171813Y.0000000148](https://doi.org/10.1179/1362171813Y.0000000148).
- Атрошенко В.В., Селиванов А.С., Логачёв Ю.В., Кагарманов Э.И., Сафиуллин П.Ш. Современное состояние и перспективы развития сварки изделий из меди трением с перемешиванием // *Сварка и диагностика*. 2021. № 2. С. 39–42. DOI: [10.52177/2071-5234_2021_02_39](https://doi.org/10.52177/2071-5234_2021_02_39).
- Kumar A., Raju L.S. Influence of tool pin profiles on friction stir welding of copper // *Materials and Manufacturing Processes*. 2012. Vol. 27. № 12. P. 1414–1418. DOI: [10.1080/10426914.2012.689455](https://doi.org/10.1080/10426914.2012.689455).
- Lee W.-B., Jung S.-B. The joint properties of copper by friction stir welding // *Materials Letters*. 2004. Vol. 58. № 6. P. 1041–1046. DOI: [10.1016/j.matlet.2003.08.014](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2003.08.014).
- Asadi P., Mirzaei M., Akbari M. Modeling of pin shape effects in bobbin tool FSW // *International Journal of Lightweight Materials and Manufacture*. 2022. Vol. 5. № 2. P. 162–177. DOI: [10.1016/j.ijlmm.2021.12.001](https://doi.org/10.1016/j.ijlmm.2021.12.001).
- Mehta K.P., Badheka V.J. A review on dissimilar friction stir welding of copper to aluminum: process, properties, and variants // *Materials and Manufacturing Processes*. 2016. Vol. 31. № 3. P. 233–254. DOI: [10.1080/10426914.2015.1025971](https://doi.org/10.1080/10426914.2015.1025971).
- Liua X.C., Sun Y.F., Nagira T., Ushioda K., Fujii H. Evaluation of dynamic development of grain structure during friction stir welding of pure copper using a quasi in situ method // *Journal of Materials Science and Technology*. 2019. Vol. 35. № 7. P. 1412–1421. DOI: [10.1016/j.jmst.2019.01.018](https://doi.org/10.1016/j.jmst.2019.01.018).

REFERENCES

- Albannai A.I. Review the common defects in friction stir welding. *International journal of scientific and technology research*, 2020, vol. 9, no. 11, pp. 318–329.
- Sahlot P., Singh A.K., Badheka V., Arora A. Friction stir welding of copper: numerical modeling and validation. *Transactions of the Indian Institute of Metals*, 2019, vol. 72, no. 5, pp. 1339–1347. DOI: [10.1007/s12666-019-01629-9](https://doi.org/10.1007/s12666-019-01629-9).
- Singh V.P., Patel S.K., Ranjan A., Kuriachen B. Recent research progress in solid state friction-stir welding of aluminium-magnesium alloys: a critical review. *Journal of Materials Research and Technology*, 2020, vol. 9, no. 3, pp. 6217–6256. DOI: [10.1016/j.jmrt.2020.01.008](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.01.008).
- Heidarzadeh A., Paidar M., Güleriyüz G., Vatankhah Barenji R. Application of nanoindentation to evaluate the hardness and yield strength of brass joints produced by FSW: microstructural and strengthening mechanisms. *Archives of Civil and Mechanical Engineering*, 2020, vol. 20, no. 2, article number 41. DOI: [10.1007/s43452-020-00046-w](https://doi.org/10.1007/s43452-020-00046-w).

5. Zhang H., Wang M., Zhu Z., Zhang X., Yu T., Yang G.X. Improving the structure-property of aluminum alloy friction stir weld by using a non-shoulderplunge welding tool. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2016, vol. 87, no. 1-4, pp. 1095–1104. DOI: [10.1007/s00170-016-8599-z](https://doi.org/10.1007/s00170-016-8599-z).
6. Akinlabi E.T., Mahamood R.M. Introduction to Friction Welding, Friction Stir Welding and Friction Stir Processing. *Solid-State Welding: Friction and Friction Stir Welding Processes*. Springer, 2020, pp. 1–12. DOI: [10.1007/978-3-030-37015-2_1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-37015-2_1).
7. Zhang Y., Cao X., Larose S., Wanjara P. Review of tools for friction stir welding and processing. *Canadian Metallurgical Quarterly*, 2012, vol. 51, no. 3, pp. 250–261. DOI: [10.1179/1879139512Y.0000000015](https://doi.org/10.1179/1879139512Y.0000000015).
8. Rai R., De A., Bhadeshia H.K.D.H., DebRoy T. Review: Friction stir welding tools. *Science and Technology of Welding and Joining*, 2011, vol. 16, no. 4, pp. 325–342. DOI: [10.1179/1362171811Y.0000000023](https://doi.org/10.1179/1362171811Y.0000000023).
9. Mishra R.S., Ma Z.Y. Friction stir welding and processing. *Materials science and engineering*, 2005, vol. 50, no. 1-2, pp. 1–78. DOI: [10.1016/j.mser.2005.07.001](https://doi.org/10.1016/j.mser.2005.07.001).
10. Li X., Zhang Z., Peng Y., Yan D., Tan Z., Zhou Q., Wang K., Zhou M. Microstructure and mechanical properties of underwater friction stir welding of CNT/Al-Cu-Mg composites. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, vol. 18, pp. 405–415. DOI: [10.1016/j.jmrt.2022.02.089](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.02.089).
11. Singh G., Thakur A., Singh S., Sharma N. Friction stir welding of copper: Processing and multi-objective optimization. *Indian Journal of Engineering and Materials Sciences*, 2020, vol. 27, no. 3, pp. 709–716.
12. Shen J.J., Liu H.J., Cui F. Effect of welding speed on microstructure and mechanical properties of friction stir welded copper. *Materials and Design*, 2010, vol. 31, no. 8, pp. 3937–3942. DOI: [10.1016/j.matdes.2010.03.027](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2010.03.027).
13. Hwang Y.M., Fan P.L., Lin C.H. Experimental study on Friction Stir Welding of copper metals. *Journal of Materials Processing Technology*, 2010, vol. 210, no. 12, pp. 1667–1672. DOI: [10.1016/j.jmatprotec.2010.05.019](https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2010.05.019).
14. Farrokhi H., Heidarzadeh A., Saeid T. Frictions stir welding of copper under different welding parameters and media. *Science and Technology of Welding and Joining*, 2013, vol. 18, no. 8, pp. 697–702. DOI: [10.1179/1362171813Y.0000000148](https://doi.org/10.1179/1362171813Y.0000000148).
15. Atroshchenko V.V., Selivanov A.S., Logachev Yu.V., Kagarmenov E.I., Safiullin R.Sh. Current state and prospects for the development of friction stir welding of copper products. *Svarka i diagnostika*, 2021, no. 2, pp. 39–42. DOI: [10.52177/2071-5234_2021_02_39](https://doi.org/10.52177/2071-5234_2021_02_39).
16. Kumar A., Raju L.S. Influence of tool pin profiles on friction stir welding of copper. *Materials and Manufacturing Processes*, 2012, vol. 27, no. 12, pp. 1414–1418. DOI: [10.1080/10426914.2012.689455](https://doi.org/10.1080/10426914.2012.689455).
17. Lee W.-B., Jung S.-B. The joint properties of copper by friction stir welding. *Materials Letters*, 2004, vol. 58, no. 6, pp. 1041–1046. DOI: [10.1016/j.matlet.2003.08.014](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2003.08.014).
18. Asadi P., Mirzaei M., Akbari M. Modeling of pin shape effects in bobbin tool FSW. *International Journal of Lightweight Materials and Manufacture*, 2022, vol. 5, no. 2, pp. 162–177. DOI: [10.1016/j.ijlmm.2021.12.001](https://doi.org/10.1016/j.ijlmm.2021.12.001).
19. Mehta K.P., Badheka V.J. A review on dissimilar friction stir welding of copper to aluminum: process, properties, and variants. *Materials and Manufacturing Processes*, 2016, vol. 31, no. 3, pp. 233–254. DOI: [10.1080/10426914.2015.1025971](https://doi.org/10.1080/10426914.2015.1025971).
20. Liua X.C., Sun Y.F., Nagira T., Ushioda K., Fujii H. Evaluation of dynamic development of grain structure during friction stir welding of pure copper using a quasi in situ method. *Journal of Materials Science and Technology*, 2019, vol. 35, no. 7, pp. 1412–1421. DOI: [10.1016/j.jmst.2019.01.018](https://doi.org/10.1016/j.jmst.2019.01.018).

The study of the effect of parameters of the mode of copper friction stir welding on the mechanical properties and electrical conductivity of welded joints

© 2022

Valery V. Atroshchenko^{1,3}, Doctor of Sciences (Engineering),
Head of Chair of Modern Methods of Welding and Structural Control
Aleksey S. Selivanov^{*2,4}, PhD (Engineering), Head of Scientific and Technical Department
Vladislav S. Lobachev^{2,5}, engineer of Scientific and Technical Department
Yury V. Logachev^{1,6}, graduate student
Artyom R. Sadrislamov^{1,7}, graduate student

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

²Limited Liability Company “Attestation Center SvarkaTechService”, Ufa (Russia)

*E-mail: selivanov@naks-rb.ru

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7145-7532>

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9631-2102>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0615-5401>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4575-9670>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9528-3266>

Received 27.04.2022

Accepted 27.07.2022

Abstract: Copper is widely used when producing current-conducting parts, basically the electrotechnical power equipment buses. Traditional ways of welding copper become complicated because of high thermal conductivity, fluidity, significant oxidation at fusing temperature, and susceptibility. The application of the solid-phase welding methods, a prominent representative of which is friction stir welding (FSW), is one of the ways to solve problems when welding copper. The paper presents the experimental study of the influence of a tool working part shape and the welding mode parameters:

welding rate, tool rotation frequency, and tool dip angle – on the possibility of the appearance of defects in welded joints of M1 copper plates of 5 mm in thickness produced by FSW. The paper contains the results of mechanical tests on static tension and bending of welded joints with a tunnel defect and without it. Welded joints with a tunnel defect showed a decrease in mechanical properties level: the value of ultimate tensile strength at stretching is lower by 33 %, and the specific elongation is lower by 8 % than ones of a joint without defects. The authors specify some factors influencing the appearance of defects at FSW: the welding rate, tool rotation frequency, tool working part construction, tool dip angle, strength and depth of immersion, pin displacement, blank thickness, and grip conditions. The study identified that the application of a tool with a concave surface taper shoulder allows producing welded joints without external and internal defects. Based on data obtained during the experimental research, the authors determined the welding modes, which makes it possible to produce welded joints with the electrical resistance value at the level of a parent metal: tool rotation frequency is 1250 rpm, welding rate is 25 mm/min, and tool immersion depth is no less than 0.41 mm.

Keywords: FSW; friction stir welding; copper welding; welded joint; mechanical properties; electrical conductivity.

For citation: Atroshchenko V.V., Selivanov A.S., Lobachev V.S., Logachev Yu.V., Sadrislamov A.R. The study of the effect of parameters of the mode of copper friction stir welding on the mechanical properties and electrical conductivity of welded joints. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 50–60. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-50-60.

Моделирование дислокационного электропластического эффекта в монокристалле методом молекулярной динамики

© 2022

Брызгалов Владимир Александрович^{*1,5}, магистрант**Дмитриев Сергей Владимирович**^{2,6}, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник**Корзникова Елена Александровна**^{1,7}, доктор физико-математических наук, профессор**Бебихов Юрий Владимирович**^{3,8}, кандидат физико-математических наук, доцент¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)²Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, Уфа (Россия)³Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Мирный (Россия)

*E-mail: bryzgalovv2000@gmail.com

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7435-0001>⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>⁸ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Поступила в редакцию 04.05.2022

Принята к публикации 27.07.2022

Аннотация: Электропластический эффект – это снижение сопротивления металлических кристаллов деформированию под влиянием импульсного электрического тока высокой плотности. Применение данного эффекта позволяет проводить деформационную обработку относительно хрупких металлов без резкого повышения температуры, что уменьшает вероятность негативного влияния температуры на материал. В статье рассматривается влияние электропластического эффекта на изменение деформирующего усилия и динамику дислокаций для двумерной модели монокристалла, взаимодействие атомов в которой основано на методе молекулярной динамики при использовании потенциала Морзе. Предложена модель, реализующая электропластический эффект посредством увеличения общей кинетической энергии системы не равномерно по всему объему кристалла, а в зависимости от потенциальной энергии атомов. Считается, что в результате прохождения импульса электрического тока возрастает кинетическая энергия атомов пропорционально кубу их потенциальной энергии. Более высокую потенциальную энергию имеют атомы вблизи дефектов, поэтому температура будет повышаться в области дефектов сильнее, увеличивая их подвижность. Проведено моделирование движения дислокаций под воздействием сдвигающих напряжений и температуры с учетом влияния импульсов электрического тока на систему. Описаны зависимости предела текучести от температуры без учета электропластического эффекта, а затем – с его учетом. Построены графики зависимости кинетической энергии системы от частоты и мощности импульсов тока. Показано, что электропластический эффект резко снижает предел текучести кристалла, тем самым увеличивая температуру в системе. Это связано с тем, что, помимо общего разогрева, система подвергается локальному нагреву атомов вблизи дефектов, что облегчает движение последних.

Ключевые слова: электропластический эффект; молекулярная динамика; дислокации; предел текучести; потенциал Морзе.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УГАТУ» (соглашение № 075-03-2022-318/1) «Молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ "Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях"» для В.А. Брызгалова (проведение расчетов), гранта НШ-4320.2022.1.2 для Е.А. Корзниковой (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ 21-12-00229 для С.В. Дмитриева (постановка задачи, концептуализация исследования).

Для цитирования: Брызгалов В.А., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Бебихов Ю.В. Моделирование дислокационного электропластического эффекта в монокристалле методом молекулярной динамики // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 61–68. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-61-68.

ВВЕДЕНИЕ

Электропластический эффект является одним из эффективных методов улучшения технологических свойств электропроводящих материалов. Данный эффект позволяет повышать пластичность металлов, управлять процессами зарождения и развития дислокационной структуры, снижать усилия, необходимые для обработки материала [1–3].

Одной из гипотез, объясняющих явление снижения предела текучести материала в случае присутствия электрического тока, является предположение о локализации джоулева тепла на дефектах решетки, что, в свою очередь, приводит к снижению потенциальных барьеров их миграции.

Электропластический эффект был впервые обнаружен в середине XX века при действии одиночными импульсами тока с плотностью $\sim 10^9$ А/м² и длительностью

около 0,1 мс на деформацию кристаллов цинка сжатием и растяжением [4–6]. В работе [7] показано, что электрический импульс приводит к интенсивному размножению двойникоующих дислокаций и коллективному взаимодействию их винтовых составляющих с препятствиями. При действии электрического тока возможно нарушение закона Холла – Петча, что было показано на примере пленок AZ31 в работе [8]. Также было проведено моделирование для двойникоующихся материалов [9] и установлено, что под воздействием электрического тока облегчается преодоление двойникоующими дислокациями структурных несовершенств кристаллической структуры. Были проведены эксперименты по применению тока к прокатке малоуглеродистой мартенситной стали [10], в ходе механической обработки которой сильно возросло относительное удлинение. В керамике электропластический эффект сильно снижает предел текучести при относительно небольшой напряженности электрического поля (1 КВ/см²) [11]. В никелевых [12; 13] и алюминиевых [14; 15] сплавах электропластический эффект снижает сопротивляемость деформированию и ускоряет ползучесть. Также исследователями было экспериментально показано снижение предела текучести в нержавеющей стали AISI 316L при электропластической деформации [16]. Во всех вышеупомянутых исследованиях было показано, что электропластический эффект облегчает пластическую деформацию для различных материалов.

В монокристаллах преобладает дислокационный электропластический эффект, описанный в ходе эксперимента в работе [17] для монокристалла никеля.

В настоящей работе изучено движение дислокаций в двумерной модели монокристалла под воздействием электрического тока и проанализирован эффект дислокационной электропластичности. Новизна работы заключается в том, что дислокационная электропластичность исследуется в модели двумерного монокристалла, наглядность которой позволяет легко визуализировать исследуемые процессы. Для моделирования применялся метод молекулярной динамики с использованием потенциала Морзе, так как он наиболее пригоден для небольших моделей атомов на коротком интервале времени.

Цель работы – изучение влияния дислокационного электропластического эффекта на пластические свойства двумерной модели монокристалла, построенной при помощи метода молекулярной динамики.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследование проводилось при помощи метода молекулярной динамики (МД). Данный метод позволяет определять эволюцию ансамбля атомов при помощи интегрирования уравнений их движения. Траектории атомов и молекул в этом методе определяются путем численного решения уравнений движения Ньютона для системы взаимодействующих частиц, в которой силы между частицами и их потенциальные энергии рассчитываются с использованием межатомных потенциалов или силовых полей молекулярной механики [18].

Для описания взаимодействия атомов в работе использовался межатомный потенциал Морзе (рис. 1). Данный потенциал является функцией потенциальной

энергии электростатического поля, предложенной американским физиком Филиппом Морзе как аппроксимация для энергии двухатомной молекулы [19; 20]. Потенциал имеет вид:

$$U = D_e \left(1 - e^{-\alpha(r-r_e)}\right)^2,$$

где D_e – глубина потенциальной ямы;
 r_e – равновесное расстояние;
 α – коэффициент жесткости потенциала;
 r – межъядерное расстояние.

В работе использовались следующие параметры потенциала Морзе: $D_e=1$, $r_e=1$, $\alpha=6$. Радиус обрезки потенциала равен 5 межатомных расстояний. Все расчеты проводились в безразмерных единицах. В качестве единицы энергии связи двух атомов выступала глубина потенциала Морзе. Единица расстояния – это равновесное межатомное расстояние для пары атомов. Единица времени была выбрана таким образом, чтобы масса атома равнялась единице. Выбор этих единиц измерения не снижает общности и не влияет на физику рассматриваемых процессов. Использование в данной работе безразмерных параметров потенциала обусловлено тем, что не ставилась задача изучения конкретного материала, а анализировалась двумерная модель монокристалла.

Потенциал Морзе содержит один существенный параметр α , который не может быть безразмерен. Данный параметр определяет жесткость потенциала Морзе. Его типичные значения лежат в диапазоне $\alpha=[4; 6]$. Нами было выбрано значение $\alpha=6$, так как чем выше коэффициент α , тем меньше дальное действие потенциала, и можно брать относительно небольшой радиус обрезки потенциала с целью ускорения расчетов. Величины параметров потенциала были выбраны из соображений удобства и быстроты вычислений, так как данное исследование направлено на составление методик изучения электропластического эффекта с целью их применения в будущих работах для реальных материалов.

Расчеты проводились с использованием программы, написанной на языке C++ в оболочке Builder 6. Была построена модель двумерного монокристалла и при помощи метода МД определено межатомное расстояние в кристалле $\alpha=0,995$ (равновесное межатомное расстояние между парой атомов равно 1, а под действием дальнедействующих сил в ходе релаксации структуры равновесное расстояние между атомами в кристалле снижается до указанного значения). Расчетная ячейка имела размер 256×256 атомов, на нее накладывались периодические граничные условия. Затем из системы была удалена цепочка атомов посередине расчетной ячейки для создания призматической дислокационной петли; после релаксации в структуре образовались две дислокации (рис. 2).

Затем система подвергалась действию монотонно увеличивающейся сдвиговой деформации вкупе с подъемом температуры. Температура задавалась путем ввода случайных начальных смещений атомам в указанном диапазоне. Чем больше диапазон, тем выше температура. Для моделирования импульсов электрического тока была увеличена кинетическая энергия системы. Задачей являлось сделать так, чтобы энергия в большей мере

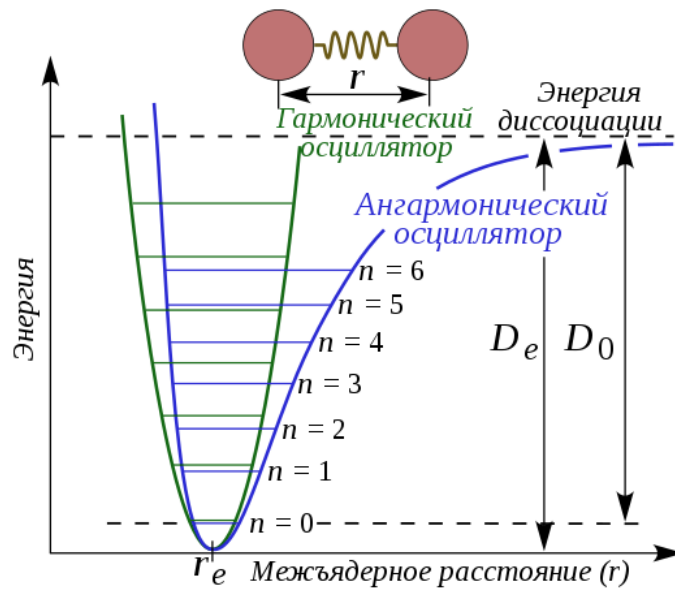


Рис. 1. Вид потенциала Морзе в зависимости от расстояния между ядрами двух атомов. Для сравнения показан потенциал и уровни энергии гармонического осциллятора.
n – главное квантовое число

Fig. 1. Morse potential view depending on the distance between the nuclei of two atoms. For comparison, the potential and energy levels of the harmonic oscillator are shown.
n – the main quantum number

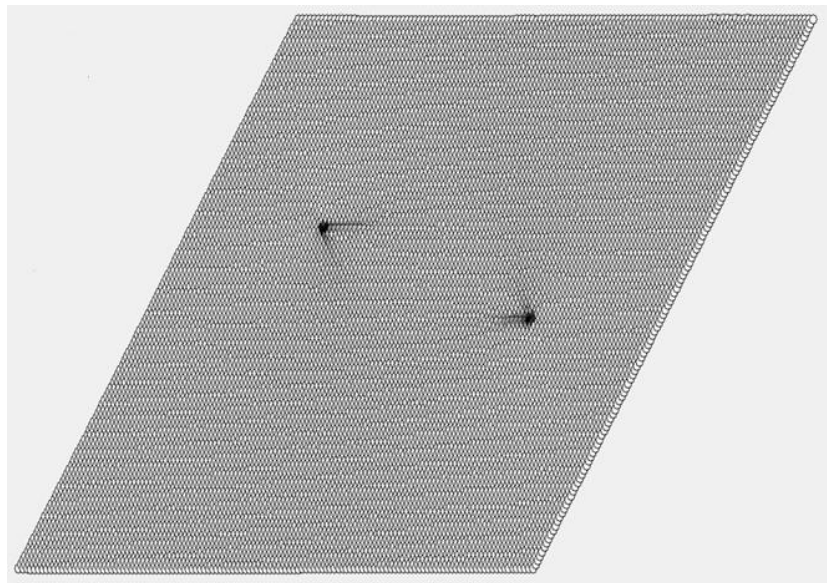


Рис. 2. Модель двумерного монокристалла с введенными в него двумя дислокациями (атомы окрашены в соответствии с величиной потенциальной энергии; черным цветом показаны атомы с максимальной энергией, они располагаются вблизи ядер дислокаций)

Fig. 2. The model of a two-dimensional single crystal with two dislocations introduced into it (atoms are colored in accordance with their potential energy; atoms with large energy are shown in black, they are located near the dislocation cores)

выделялась на атомах с высокой потенциальной энергией, следовательно, на тех, которые находятся вблизи дефектов. Таким образом, потенциальная энергия атомов использовалась для расчета прироста кинетической энергии и, следовательно, температуры атомов. Уравнение, задающее прирост температуры (кинетической энергии) *n*-го атома системы, имеет вид:

$$dK_n = pK \left(\frac{P_n - P_{\min}}{P_{\max} - P_{\min}} \right)^3, \quad (1)$$

где *p* – параметр, определяющий мощность тока;
P_n – потенциальная энергия *n*-го атома;
K – кинетическая энергия всей системы (пропорциональна температуре кристалла);

P_{\min} и P_{\max} – минимальная и максимальная потенциальная энергия атомов в системе соответственно.

Как видно из выражения (1), прирост кинетической энергии n -го атома пропорционален температуре кристалла (его кинетической энергии K) и пропорционален кубу потенциальной энергии n -го атома.

Для мощности тока устанавливалось значение $p=0,001$, частота импульсов тока – каждые 7,5 единиц времени (моделирование занимает 62,2 единицы времени). Параметры были подобраны так, чтобы система не перегревалась до плавления и сохраняла свою кристаллическую структуру.

Для построения зависимости предела текучести от температуры моделирование проводилось для различных значений сдвиговых деформаций и температуры. Если сдвигающие напряжения, возникшие в системе в момент приложения заданной сдвиговой деформации, показывают тенденцию к уменьшению, то считалось, что в системе идет пластическая деформация и сдвигающие напряжения превышают напряжение течения. Например, на рис. 3 сдвигающие напряжения уменьшаются с течением времени, что позволяет сказать, что при данных параметрах в системе начинается пластическая деформация. Пик в начале графика связан с релаксацией системы после задания начальных смещений атомов для введения значений температуры.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В ходе моделирования была построена зависимость предела текучести от температуры для двух случаев: а) модели 256×256 атомов, без применения импульсов тока; б) модели 256×256 атомов, с учетом электропластического эффекта. Из рис. 4 видно, что до повышения температуры до $T=0,08$ предел текучести практически не изменяется; после же наблюдается резкое снижение предела текучести с увеличением температуры системы. Применение электрического тока при

водит к более интенсивному снижению предела текучести. Для того чтобы определить, как данные параметры влияют на величину электропластического эффекта, были построены зависимости кинетической энергии системы от количества импульсов тока (рис. 5, при построении графика коэффициент мощности тока был постоянен и равен $p=0,001$) и от его мощности (рис. 6, в данном расчете за 62,5 единиц времени было применено 8 импульсов тока). Как видно из рис. 5, кинетическая энергия практически не меняется при температуре $T=0,1$, несмотря на относительно высокое значение деформации сдвига. Вместе с этим при небольшом увеличении температуры и снижении деформации сдвига кинетическая энергия резко увеличивается с повышением числа импульсов тока.

На рис. 6 можно заметить, что кинетическая энергия системы резко увеличивается при превышении мощностью импульсов тока некоторого значения. Это предельное значение уменьшается при повышении температуры. Так, при температуре $T=0,12$ резкий рост кинетической энергии наблюдается при мощности тока $p=0,003$, а в случае $T=0,1$ – при значении $p=0,007$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты, представленные на рис. 4, показывают, что резкое снижение предела текучести при относительно высоких температурах связано с наличием потенциала Пайерлса – Набарро, который легче преодолевается дислокациями при повышенных температурах. Электропластический эффект же существенно снижает предел текучести только при достаточно высоких температурах.

Анализ графиков зависимости кинетической энергии системы от количества импульсов тока (рис. 5) и его мощности (рис. 6) показал, что, несмотря на относительно высокое значение деформации сдвига, при более низкой температуре кинетическая энергия

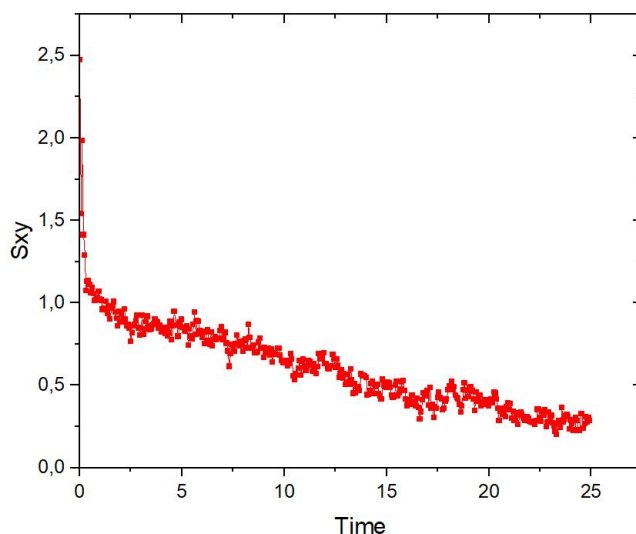


Рис. 3. Пример графика зависимости сдвигающих напряжений от времени. Величина сдвиговой деформации: $\varepsilon_{xy}=0,037$ при температуре $T=0,13$

Fig. 3. An example of a plot of shear stress versus time. Shear strain value: $\varepsilon_{xy}=0.037$, at the temperature of $T=0.13$

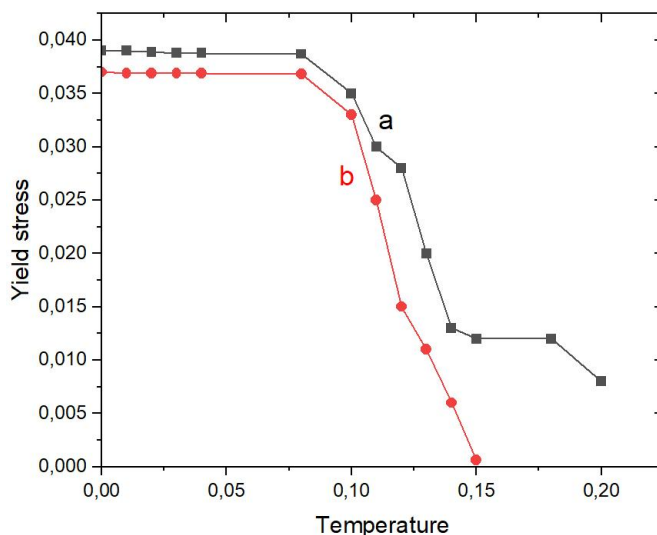


Рис. 4. Зависимость предела текучести от температуры:
a – модель 256×256 атомов, без применения импульсов тока;
b – модель 256×256 атомов, с учетом электропластического эффекта
Fig. 4. Yield stress versus temperature:
a – a model containing 256×256 atoms, without the use of current pulses;
b – a model containing 256×256 atoms, taking into account the electro-plastic effect

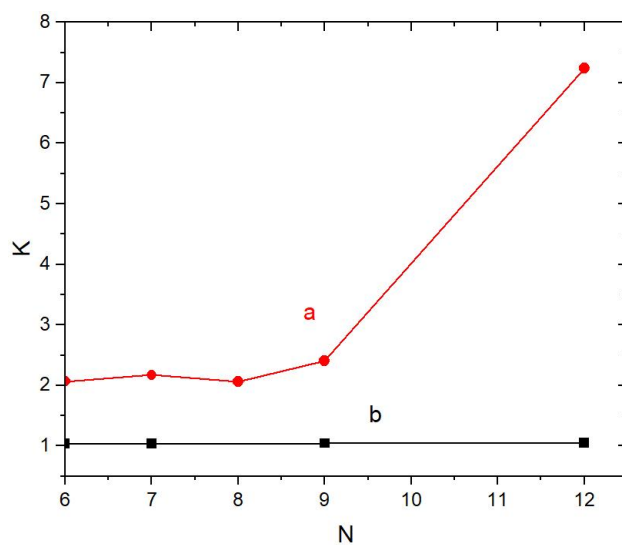


Рис. 5. Зависимость общей кинетической энергии системы от количества импульсов тока, примененных за время счета (62,5 единиц времени):
a – при сдвиговой деформации $\varepsilon=0,016$ и температуре $T=0,12$; **b** – $\varepsilon=0,033$ и $T=0,1$
Fig. 5. Total kinetic energy of the system versus the number of current pulses applied during the simulation run (62.5 time units):
a – with shear deformation $\varepsilon=0.016$ and temperature $T=0.12$; **b** – $\varepsilon=0.033$ and $T=0.1$

кристалла практически не изменяется (кривые *b*). Это связано с тем, что дислокации относительно слабо разогреты импульсами тока и двигаются термофлуктуационно, так как им тяжело преодолеть барьер Пайерлса – Набарро. При относительно небольшом увеличении температуры и снижении деформации сдвига кинетическая энергия резко увеличивается с повышением количества импульсов тока и мощности тока (кривые *a*). Резкий скачок кинетической энергии системы связан

с тем, что при относительно высоких значениях параметров тока и температуры происходит надбарьерное скольжение дислокаций, и в ходе этого скольжения дислокации выделяют большое количество тепла. Разогрев происходит за счет выделения тепла, связанного с работой приложенного сдвигающего напряжения на совершение пластической деформации. Кинетическая энергия системы входит в формулу (1), согласно которой повышение температуры материала ускоряет его разогрев.

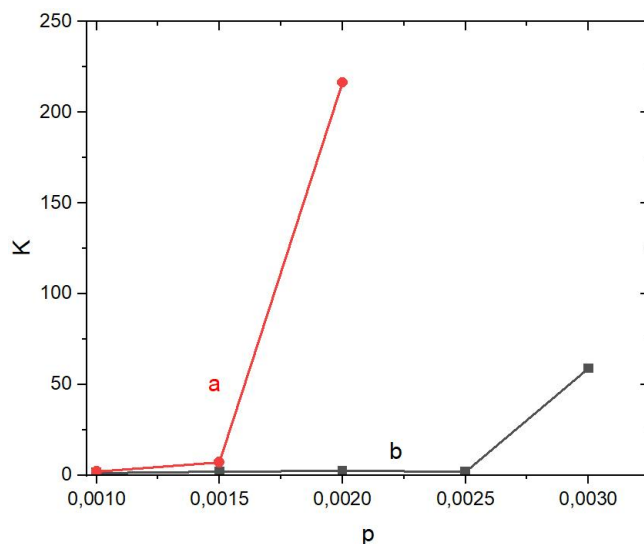


Рис. 6. Зависимость общей кинетической энергии системы от мощности тока: **a** – при сдвиговой деформации $\varepsilon=0,016$ и температуре $T=0,12$; **b** – $\varepsilon=0,033$ и $T=0,1$

Fig. 6. Total kinetic energy of the system versus the current power;

a – with shear deformation $\varepsilon=0.016$ and temperature $T=0.12$; **b** – $\varepsilon=0.033$ and $T=0.1$

Из полученных данных можно видеть, что электропластический эффект существенно облегчает пластическую деформацию, особенно при увеличении температуры системы.

Продоланная работа является первым шагом к изучению электропластического эффекта в реальных металлических монокристаллах. В данной работе этот эффект объясняется преимущественным выделением джоулева тепла на дефектах кристаллической структуры, подвижность которых и обеспечивает протекание пластической деформации. Помимо дислокаций, в будущих работах планируется рассмотреть границы зерен, что поможет определить вклад электростимулированного зернограничного проскальзывания в пластическую деформацию поликристаллов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Создана молекулярно-динамическая модель двумерного монокристалла с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалом Морзе. Предложены способ введения краевых дислокаций в систему и модель применения импульсов электрического тока к системе. Проведено моделирование движения дислокаций при заданных сдвиговых деформациях и температурах.

2. Анализ графиков зависимости предела текучести от температуры без применения тока и с применением импульсного тока показал, что электропластический эффект существенно облегчает движение дислокаций только при достаточно высокой температуре кристалла. Это связано с наличием потенциала Пайерлса – Набарро, который легче преодолевается дислокациями при повышенных температурах.

3. Анализ графиков зависимости общей кинетической энергии системы от частоты импульсов тока и от их мощности показал, что параметры тока оказывают влияние на электропластичность материала, в особен-

ности при повышенной температуре. Это связано с тем, что при относительно низкой температуре дислокации двигаются термофлуктуационно и слабо разогревают систему, а при повышенной температуре дислокации двигаются посредством надбарьерного скольжения, в ходе которого происходит резкий разогрев системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Столяров В.В. Электропластический эффект в титановых сплавах // Вестник научно-технического развития. 2013. № 3. С. 35–39.
2. Троицкий О.А., Баранов Ю.В., Авраамов Ю.С., Шляпин А.Д. Физические основы и технологии обработки современных материалов. Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. Т. 1–2.
3. Троицкий О.А. Электромеханический эффект в металлах // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1969. № 10. С. 18–22.
4. Кравченко В.Я. Воздействие направленного потока электронов на движущиеся дислокации // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1966. Т. 51. № 6. С. 1676–1678.
5. Кравченко В.Я. Влияние электронов на торможение дислокаций в металлах // Физика твердого тела. 1966. Т. 8. № 3. С. 927–935.
6. Климов К.М., Шнырев Г.Д., Новиков И.И. Об электропластичности металлов // Доклады АН СССР. 1974. Т. 219. № 2. С. 323–324.
7. Савенко В.С. Электропластичность двойникующихся металлов // Веснік МДПУ імя І.П. Шамякіна. 2009. № 1. С. 154–158.
8. Xiao X., Xu Sh., Sui D., Zhang H. The electroplastic effect on the deformation and twinning behavior of AZ31 foils during micro-bending test // Materials Letters. 2021. Vol. 288. Article number 129362. DOI: [10.1016/j.matlet.2021.129362](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129362).

9. Влашевич В.В., Остриков О.М. Моделирование электропластического эффекта при механическом микродвойниковании // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2014. Т. 10. № 6. С. 146–149. EDN: [TGLEJF](#).
10. Qian L., Zhan L., Zhou B., Zhang X., Liu S., Lv Z. Effects of electroplastic rolling on mechanical properties and microstructure of low-carbon martensitic steel // *Materials Science and Engineering A*. 2021. Vol. 812. Article number 141144. DOI: [10.1016/j.msea.2021.141144](#).
11. Conrad H. Electroplasticity in metals and ceramics // *Materials Science and Engineering A*. 2000. Vol. 287. № 2. P. 276–287. DOI: [10.1016/S0921-5093\(00\)00786-3](#).
12. Liu Y.Z., Meng B., Du M., Wan M. Electroplastic effect and microstructural mechanism in electrically assisted deformation of nickel-based superalloys // *Materials Science and Engineering A*. 2022. Vol. 840. Article number 142975. DOI: [10.1016/j.msea.2022.142975](#).
13. Demler E., Gerstein G., Dalinger A., Epishin A., Rodman D., Nürnberger F. Influence of High-Current-Density Impulses on the Compression Behavior: Experiments with Iron and a Nickel-Based Alloy // *Journal of Materials Engineering and Performance*. 2016. Vol. 26. № 2. P. 177–184. DOI: [10.1007/s11665-016-2457-x](#).
14. Bumgardner C.H., Croom B.P., Song N., Zhang Yu., Li X. Low energy electroplasticity in aluminum alloys // *Materials Science and Engineering A*. 2020. Vol. 798. Article number 140235. DOI: [10.1016/j.msea.2020.140235](#).
15. Krishnaswamy H., Kim M.J., Hong S.-T., Kim D., Song J.-H., Lee M.-G., Han H.N. Electroplastic behaviour in an aluminium alloy and dislocation density based modelling // *Materials and Design*. 2017. Vol. 124. P. 131–142. DOI: [10.1016/j.matdes.2017.03.072](#).
16. Mai J., Peng L., Lin Zh., Lai X. Experimental study of electrical resistivity and flow stress of stainless steel 316L in electroplastic deformation // *Materials Science and Engineering A*. 2011. Vol. 528. № 10-11. P. 3539–3544. DOI: [10.1016/j.msea.2011.01.058](#).
17. Li X., Turner J., Bustillo K., Minor A.M. In situ transmission electron microscopy investigation of electroplasticity in single crystal nickel // *Acta Materialia*. 2022. Vol. 223. Article number 117461. DOI: [10.1016/j.actamat.2021.117461](#).
18. Проценко С.П., Байдаков В.Г., Козлова З.Р. Молекулярно-динамическое моделирование метастабильных фазовых состояний. Термодинамические свойства Леннард-Джонсовской системы // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. 2014. Т. 18. № 1. С. 214–223. EDN: [SDHUND](#).
19. Zhou Y., Karplus M., Ball K.D., Berry R.S. The distance fluctuation criterion for melting: Comparison of square-well and Morse potential models for clusters and homopolymers // *Journal of Chemical Physics*. 2002. Vol. 116. № 5. P. 2323–2329. DOI: [10.1063/1.1426419](#).
20. Zhou K., Liu B. Fundamentals of classical molecular dynamics simulation // *Molecular Dynamics Simulation*. Amsterdam: Elsevier, 2022. P. 1–40. DOI: [10.1016/B978-0-12-816419-8.00006-4](#).

REFERENCES

1. Stolyarov V.V. Electroplastic effect in titanium alloys. *Vestnik nauchno-tekhnicheskogo razvitiya*, 2013, no. 3, pp. 35–39.
2. Troitsky O.A., Baranov Yu.V., Avraamov Yu.S., Shlyapin A.D. *Fizicheskie osnovy i tekhnologii obrabotki sovremennykh materialov* [Physical foundations and technologies for modern materials processing]. Izhevsk, Institut kompyuternykh issledovaniy Publ., 2004. Vol. 1–2.
3. Troitsky O.A. Electromechanical effect in metals. *Pisma v zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki*, 1969, no. 10, pp. 18–22.
4. Kravchenko V.Ya. Effect of a directed electron flow on moving dislocations. *Journal of experimental and theoretical physics*, 1966, vol. 51, no. 6, pp. 1676–1678.
5. Kravchenko V.Ya. Influence of electrons on the drag of dislocations in metals *Physics of the solid state*, 1966, vol. 8, no. 3, pp. 927–935.
6. Klimov K.M., Shnyrev G.D., Novikov I.I. On the electroplasticity of metals. *Doklady AN SSSR*, 1974, vol. 219, no. 2, pp. 323–324.
7. Savenko V.S. Electroplasticity of twinning metals. *Vesnik MDPU im. I.P. Shamyakina*, 2009, no. 1, pp. 154–158.
8. Xiao X., Xu Sh., Sui D., Zhang H. The electroplastic effect on the deformation and twinning behavior of AZ31 foils during micro-bending test. *Materials Letters*, 2021, vol. 288, article number 129362. DOI: [10.1016/j.matlet.2021.129362](#).
9. Vlashevich V.V., Ostrikov O.M. Modeling electroplastic effect at mechanical microtwinning. *Vestnik Vorontzhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2014, vol. 10, no. 6, pp. 146–149. EDN: [TGLEJF](#).
10. Qian L., Zhan L., Zhou B., Zhang X., Liu S., Lv Z. Effects of electroplastic rolling on mechanical properties and microstructure of low-carbon martensitic steel. *Materials Science and Engineering A*, 2021, vol. 812, article number 141144. DOI: [10.1016/j.msea.2021.141144](#).
11. Conrad H. Electroplasticity in metals and ceramics. *Materials Science and Engineering A*, 2000, vol. 287, no. 2, pp. 276–287. DOI: [10.1016/S0921-5093\(00\)00786-3](#).
12. Liu Y.Z., Meng B., Du M., Wan M. Electroplastic effect and microstructural mechanism in electrically assisted deformation of nickel-based superalloys. *Materials Science and Engineering A*, 2022, vol. 840, article number 142975. DOI: [10.1016/j.msea.2022.142975](#).
13. Demler E., Gerstein G., Dalinger A., Epishin A., Rodman D., Nürnberger F. Influence of High-Current-Density Impulses on the Compression Behavior: Experiments with Iron and a Nickel-Based Alloy. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2016, vol. 26, no. 2, pp. 177–184. DOI: [10.1007/s11665-016-2457-x](#).
14. Bumgardner C.H., Croom B.P., Song N., Zhang Yu., Li X. Low energy electroplasticity in aluminum alloys. *Materials Science and Engineering A*, 2020, vol. 798, article number 140235. DOI: [10.1016/j.msea.2020.140235](#).
15. Krishnaswamy H., Kim M.J., Hong S.-T., Kim D., Song J.-H., Lee M.-G., Han H.N. Electroplastic behaviour in an aluminium alloy and dislocation density

- based modelling. *Materials and Design*, 2017, vol. 124, pp. 131–142. DOI: [10.1016/j.matdes.2017.03.072](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.03.072).
16. Mai J., Peng L., Lin Zh., Lai X. Experimental study of electrical resistivity and flow stress of stainless steel 316L in electroplastic deformation. *Materials Science and Engineering A*, 2011, vol. 528, no. 10–11, pp. 3539–3544. DOI: [10.1016/j.msea.2011.01.058](https://doi.org/10.1016/j.msea.2011.01.058).
17. Li X., Turner J., Bustillo K., Minor A.M. In situ transmission electron microscopy investigation of electroplasticity in single crystal nickel. *Acta Materialia*, 2022, vol. 223, article number 117461. DOI: [10.1016/j.actamat.2021.117461](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117461).
18. Protsenko S.P., Baydakov V.G., Kozlova Z.R. Molecular-dynamics simulation of metastable phase states. Thermodynamic properties of Lennard-Jones system. *Vestnik Ufimskogo gosudarstvennogo aviatsionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2014, vol. 18, no. 1, pp. 214–223. EDN: [SDHUND](https://www.edn.ru/SDHUND).
19. Zhou Y., Karplus M., Ball K.D., Berry R.S. The distance fluctuation criterion for melting: Comparison of square-well and Morse potential models for clusters and homopolymers. *Journal of Chemical Physics*, 2002, vol. 116, no. 5, pp. 2323–2329. DOI: [10.1063/1.1426419](https://doi.org/10.1063/1.1426419).
20. Zhou K., Liu B. Fundamentals of classical molecular dynamics simulation. *Molecular Dynamics Simulation*. Amsterdam, Elsevier, 2022, pp. 1–40. DOI: [10.1016/B978-0-12-816419-8.00006-4](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-816419-8.00006-4).

Modeling of the dislocation electroplastic effect in a single crystal using the molecular dynamics method

© 2022

Vladimir A. Bryzgalov^{*1,5}, graduate student

Sergey V. Dmitriev^{2,6}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, leading researcher

Elena A. Korznikova^{1,7}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor

Yuri V. Bebikhov^{3,8}, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

²Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa (Russia)

³Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Mirny (Russia)

*E-mail: bryzgalov2000@gmail.com

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7435-0001>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

⁸ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Received 04.05.2022

Accepted 27.07.2022

Abstract: The electro-plastic effect is a decrease in the resistance of metal crystals to deformation under the influence of a high-density pulsed electric current. Applying this effect allows deformation processing of relatively brittle metals without a sharp increase in temperature while reducing the probability of temperature negatively affecting the material. The paper discusses the influence of the electro-plastic effect on the change in the deforming force and the dislocations dynamics for a two-dimensional single crystal model based on the molecular dynamics method using the Morse potential. The authors propose a model implementing the electro-plastic effect by increasing the total kinetic energy of the system not uniformly over the entire crystal volume but depending on the potential energy of atoms. It is accepted that as a result of the electric current pulse traveling, the atom's kinetic energy increases proportionally to the third degree of their potential energy. Atoms near defects have higher potential energy; therefore, the temperature will grow to a greater extent in the areas of defects, increasing their mobility. The authors simulated the motion of dislocations under the influence of shear stresses and temperature, considering the electric current pulse effect on the system. The paper describes the dependence of yield strength on temperature without taking into account the electro-plastic effect and then with it. The authors plotted the graphs of the dependence of the system's kinetic energy on the frequency and the power of current pulses. The study shows that the electro-plastic effect sharply reduces the yield strength of a crystal, increasing the temperature in the system. It is caused by the fact that, besides general heating, the system is subjected to local heating of atoms near defects, which facilitates their motion.

Keywords: electroplastic effect; molecular dynamics; dislocations; yield stress; Morse potential.

Acknowledgments: The study was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the state assignment of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “USATU” (agreement No. 075-03-2022-318/1) “Youth Research Laboratory of the REC “Metals and Alloys under the Extreme Conditions” for V.A. Bryzgalov (calculations), grant No. NSh-4320.2022.1.2 for E.A. Korznikova (analysis and discussion of the results), the RSF grant No. 21-12-00229 for S.V. Dmitriev (problem setting, research conceptualization).

For citation: Bryzgalov V.A., Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Bebikhov Yu.V. Modeling of the dislocation electroplastic effect in a single crystal using the molecular dynamics method. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 61–68. DOI: [10.18323/2782-4039-2022-3-1-61-68](https://doi.org/10.18323/2782-4039-2022-3-1-61-68).

Влияние старения на микротвердость и электропроводность сплава Cu–2 вес. % Be

© 2022

Зайнуллина Лилия Ильгизовна^{*1}, старший преподаватель кафедры материаловедения и физики металлов

*Саркеева Елена Александровна*², старший преподаватель кафедры материаловедения и физики металлов

*Александров Игорь Васильевич*³, доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры материаловедения и физики металлов

*Валиев Руслан Зуфарович*⁴, доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры материаловедения и физики металлов

Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

*E-mail: ZaynullinaLI@yandex.ru

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6116-1535>

²ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0357-8161>

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4789-4713>

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4340-4067>

Поступила в редакцию 04.05.2022

Принята к публикации 28.07.2022

Аннотация: Изделия из бериллиевых бронз получили широкое распространение в промышленности благодаря уникальному комплексу свойств: высокой теплопроводности, прочности, твердости, износостойкости, коррозионной стойкости. Они не магнитные и не дают искры при ударе, поэтому незаменимы для изготовления искробезопасных инструментов. Сплавы данной системы применяются в электротехнической промышленности, следовательно, стоит уделять внимание повышению электропроводности материалов. Работа посвящена исследованию микроструктуры, микротвердости и электропроводности сплава Cu–2 вес. % Be, подвергнутого интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК). Проведены исследования микроструктуры и тонкой структуры сплава в различных состояниях. Показано, что ИПДК приводит к формированию ультрамелкозернистого наноструктурного (УМЗ НС) состояния со средним размером зерен/субзерен 22 ± 1 нм. Дальнейшее старение образцов после ИПДК привело к незначительному увеличению размера зерен/субзерен до 31 ± 1 нм. В обоих состояниях прослеживаются наноразмерные деформационные двойники. Проведены исследования зависимости микротвердости и электропроводности сплава после ИПДК от времени последующего старения. Установлено, что микротвердость возрастает с 122 ± 3 HV в исходном состоянии до 525 ± 8 HV после ИПДК и старения. Показано, что электропроводность значительно лучше восстанавливается после проведения старения УМЗ НС состояния по сравнению с исходным состоянием. Электропроводность УМЗ НС состояния возросла с $14,5 \pm 0,1$ % IACS до значения $27,5 \pm 0,6$ % IACS при условиях, аналогичных случаю старения исходного состояния. Таким образом, в результате данных обработок сплав Cu–2 вес. % Be характеризуется повышенными прочностными свойствами и электропроводностью.

Ключевые слова: ИПДК; бериллиевая бронза; электропроводность; наноструктура.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках проекта № 0838-2020-0006 «Фундаментальные исследования новых принципов создания перспективных электромеханических преобразователей энергии с характеристиками выше мирового уровня, с повышенной эффективностью и минимальными удельными показателями, с использованием новых высокоэффективных электротехнических материалов».

Для цитирования: Зайнуллина Л.И., Саркеева Е.А., Александров И.В., Валиев Р.З. Влияние старения на микротвердость и электропроводность сплава Cu–2 вес. % Be // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 69–75. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-69-75.

ВВЕДЕНИЕ

Бериллиевые бронзы являются перспективными сплавами, широко применяемыми для производства изделий ответственного назначения. Они обладают превосходными конструкционными и функциональными свойствами, в том числе высокими прочностью, упругостью, пределами текучести и усталости, а также электро- и теплопроводностью, сопротивлением коррозии и износостойкостью [1–3]. Растворимость атомов Be в медной матрице уменьшается при понижении температуры. В связи с этим бериллиевые бронзы относятся к дисперсионно-твердеющим сплавам. Классическая обработка включает закалку на твердый раствор в диа-

пазоне температур от 700 до 800 °С с последующим низкотемпературным старением в диапазоне температур от 280 до 350 °С [4]. В процессе старения реализуется следующая последовательность фазовых превращений: однородные зоны Гинье – Престона → когерентные метастабильные γ'' -фазы → последующие γ' -фазы → равновесная γ -фаза [5–7]. В результате бериллиевые бронзы приобретают твердость до 400 HV, предел текучести ~1100 МПа при электропроводности ~15–20 % IACS [8; 9].

Методы интенсивной пластической деформации (ИПД) убедительно демонстрируют возможность формирования ультрамелкозернистых (УМЗ) наноструктурных (НС) состояний, характеризующихся привлекательными

свойствами, в различных металлических материалах [10–12]. Результаты исследования влияния ИПД кручением (ИПДК) под высоким давлением на микроструктуру, механические свойства и особенности деформационного старения бериллиевой бронзы Cu–2 вес. % Be представлены в работах [13; 14]. Авторами [13] установлено, что ИПДК, реализованная при комнатной температуре с числом оборотов, равным 5, и последующее старение обеспечивают формирование нанокристаллического (НК) состояния, характеризующегося максимальным значением микротвердости, равным 465 ± 4 HV. Полученные значения существенно превышают значение микротвердости, равное 390 HV и характерное для крупнозернистых сплавов системы Cu–Be, подвергнутых старению при оптимальных условиях.

Обеспечение сочетания высокой прочности и электропроводности не только представляет фундаментальный интерес, но и имеет большое практическое значение для инновационных применений медных сплавов в электротехнике. Как показано ранее, в случае сплавов системы Cu–Be основное внимание до настоящего времени уделялось повышению прочности за счет ИПД и последующего старения. При этом внимания увеличению значений электропроводности не уделялось.

Цель исследования – повышение электропроводности сплава Cu–2 вес. % Be за счет формирования наноструктурного состояния методом ИПДК и обеспечения более полного распада твердого раствора при последующем старении по сравнению с исходным состоянием.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для проведения исследований прутки сплава Cu–2 вес. % Be были выдержаны в электропечи Nabetherm при температуре 780°C в течение 30 мин, затем подвергнуты закалке быстрым погружением в воду. От прутков перпендикулярно их продольной оси методом электроэрозионной резки были отрезаны диски диаметром 10 мм и толщиной 1,5 мм. Это состояние принято за исходное.

ИПДК реализовали при комнатной температуре под давлением 6 ГПа с числом оборотов $N=10$ и со скоростью вращения одного из бойков, равной 0,2 об/мин.

Старение исходного состояния и постдеформационное старение состояний после ИПДК проводили при температуре 300°C в течение различных промежутков времени.

Электропроводность измеряли вихретоковым методом с использованием измерителя электропроводности ВЭ-27НЦ. Поверхность образцов для измерений была параллельна плоскости полученных дисков. Погрешность измерений составила $\pm 2\%$.

Исследования тонкой структуры проводили на просвечивающем электронном микроскопе (ПЭМ) JEM-2100 в темном и светлом полях при ускоряющем напряжении 200 кВ. Исследования были выполнены в плоскости, параллельной плоскости дисков, на расстоянии 2,5 мм от центра диска. Фольги для ПЭМ-исследований получали путем утонения образцов методом струйной электролитической полировки на установке TenuPol-5 с использованием электролита следующего состава: 1/3 часть HNO_3 и 2/3 части метанола при температуре -30°C .

Микротвердость по Виккерсу определяли с использованием микротвердомера Struers Duramin. К образцам, поверхность которых была отшлифована с использованием шлифовальной бумаги мелкой зернистости, прикладывали нагрузку 100 г в течение 10 с. Микротвердость измеряли в точках, отстоящих от центра дисков на расстоянии 2,5 мм. Полученные значения усредняли по результатам не менее 20 измерений.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Изображения микроструктуры сплава Cu–2 вес. % Be в исходном состоянии и после старения, полученные растровым электронным микроскопом, представлены на рис. 1. Исходное состояние сплава (рис. 1 а) характеризуется средним размером зерна, равным 51 ± 2 мкм. В микроструктуре наблюдаются равноосные зерна, содержащие двойники отжига. В теле зерен наблюдаются равномерно распределенные частицы NiBe. В результате последующего старения исходного состояния средний размер зерна практически не изменился и стал равным 53 ± 1 мкм (рис. 1 б). Характер распределения частиц NiBe также не изменился.

Изображения тонкой структуры сплава после ИПД и последующего старения приведены на рис. 2.

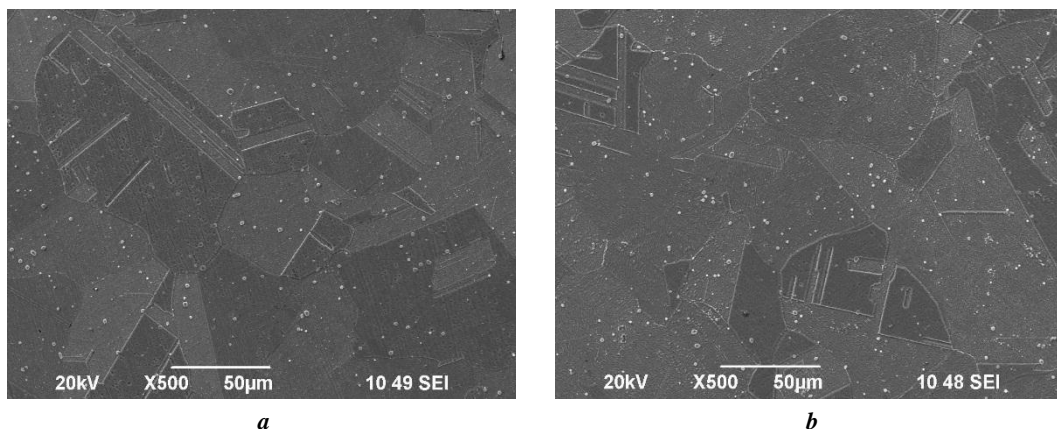


Рис. 1. Изображения микроструктуры сплава Cu–2 вес. % Be: а – в исходном состоянии; б – после старения
 Fig. 1. Images of Cu–2 wt. % Be alloy microstructure: a – in the initial state; b – after ageing

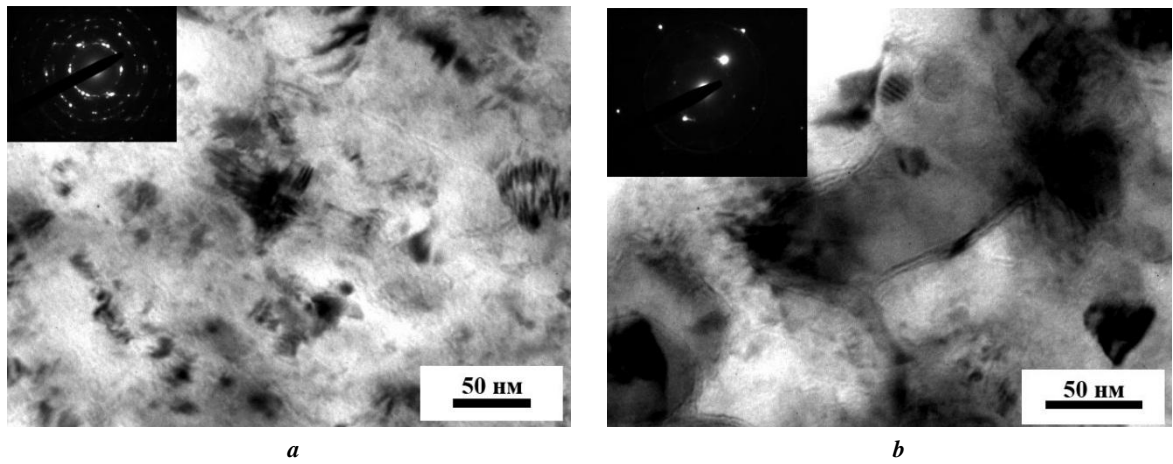


Рис. 2. Тонкая структура сплава Cu–2 вес. % Be:
a – после интенсивной пластической деформации кручением;
b – после интенсивной пластической деформации кручением и последующего старения
Fig. 2. Fine structure of the Cu–2 wt. % Be alloy:
a – after high-pressure torsion; *b* – after high-pressure torsion and ageing

В результате ИПДК в исследуемом сплаве сформировалась сильнодеформированная микроструктура с наноразмерными зёрнами и высокой плотностью дислокаций, которые расположены неравномерно (рис. 2 а). Дислокации служат местами зарождения для дальнейшего осаждения во время последующего старения. Средний размер зёрен после 10 оборотов ИПДК составляет 22 ± 1 нм. Дальнейшее старение образцов после ИПДК привело к формированию микроструктуры со средним размером зёрен 31 ± 1 нм (рис. 2 б). В обоих состояниях прослеживаются наноразмерные деформационные двойники. Двойные дифракционные точки на отснятых электронограммах для данных состояний подтверждают присутствие деформационных двойников

в микроструктуре (вставки в левом верхнем углу на рис. 2 а, 2 б).

На рис. 3 приведены зависимости изменения микротвердости и электропроводности сплава для исходного состояния и после ИПДК от времени старения. Измерения микротвердости исходного состояния показали невысокие значения, равные 122 ± 3 HV. В начале старения микротвердость для обоих состояний резко увеличивается: в исходном состоянии с 122 ± 3 HV до 370 ± 6 HV. Дальнейшее увлечение времени старения исходного состояния приводит к снижению скорости роста микротвердости. После 5 ч выдержки при 300°C микротвердость исходного состояния возросла и составила 396 ± 2 HV.

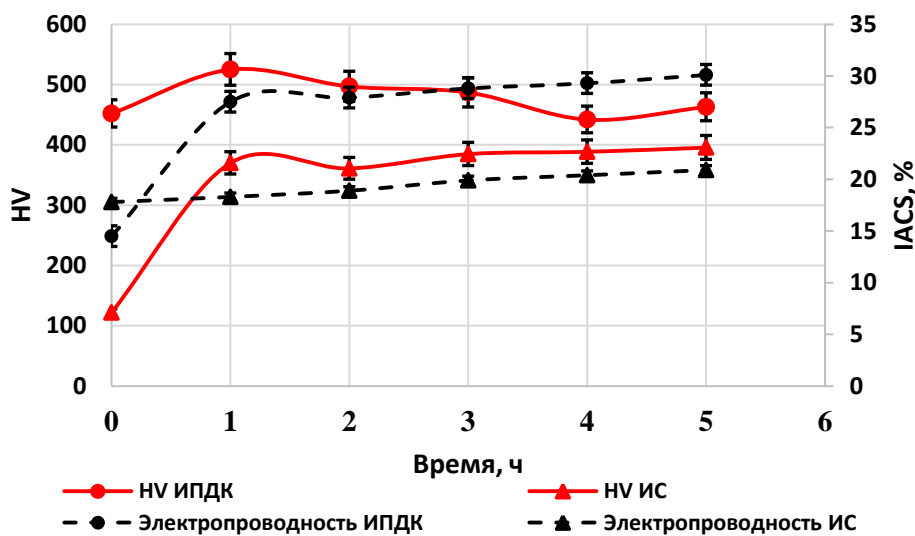


Рис. 3. Микротвердость и электропроводность сплава
Fig. 3. Microhardness and electrical conductivity of the alloy

Микротвердость после 10 оборотов ИПДК выросла с 122 ± 3 HV в исходном состоянии до 452 ± 5 HV. В результате старения в течение 1 ч состояния после ИПДК произошел рост микротвердости с 452 ± 5 HV до максимального значения 525 ± 8 HV. Дальнейшее увеличение времени старения до 5 ч привело к разупрочнению до 463 ± 5 HV.

Электропроводность исходного состояния оказалась низкой и составила $17,8 \pm 0,4$ % IACS. Дальнейшее старение в течение 1 ч исходного состояния практически не изменило величину электропроводности. Ее значение составляет $18,3 \pm 0,4$ % IACS. Увеличение времени старения до 5 ч приводит к стабильному значению электропроводности исходного состояния $20,9 \pm 0,4$ % IACS.

Электропроводность сплава после ИПДК составила $14,5 \pm 0,1$ % IACS. Новым моментом является значительно большее повышение электропроводности в результате старения УМЗ состояния по сравнению с таковым, характерным для исходного состояния. Электропроводность УМЗ состояния возросла с $14,5 \pm 0,1$ % IACS до значения $27,5 \pm 0,6$ % IACS при условиях, аналогичных случаю старения исходного состояния. Уменьшение размера зерна и повышение плотности дислокаций в процессе ИПДК способствуют увеличению скорости зародышеобразования и росту частиц. При тех же условиях в случае исходного состояния резкого увеличения электропроводности на начальном этапе старения не наблюдается. Дальнейшее увеличение времени старения приводит к снижению скорости восстановления электропроводности, и после 5 ч в случае УМЗ состояния она составляет $30,1 \pm 0,6$ % IACS.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Старение исходного состояния не привело в пределах погрешности к изменению среднего размера зерна, однако привело к росту микротвердости более чем в 3 раза. Это может быть связано с микроструктурными превращениями и появлением на ранних этапах старения выделений Cu₂Be, которые являются наименее стабильными из всех метастабильных фаз в системе Cu–Be и могут служить предшественниками появления одной из основных упрочняющих фаз [15].

В результате ИПДК микроструктура стала УМЗ. Рост микротвердости с 122 ± 3 HV в исходном состоянии до 452 ± 5 HV в результате 10 оборотов ИПДК обусловлен измельчением микроструктуры. Отметим, что полученные значения микротвердости для данного состояния превышают значения микротвердости, полученные для состояний после ИПДК с числом оборотов 10 при комнатной температуре и при 150 °С, равные 400 и 430 HV, в работе [16], а также в работе [13] после ИПДК с числом оборотов, равным 5, где микротвердость достигла значения 390 HV. Дальнейший рост микротвердости после старения может быть объяснен главным образом дисперсионным упрочнением, выделением частиц Cu₂Be из твердого раствора, в том числе на границах зерен [17; 18].

Старение исходного состояния в начальный момент времени приводит к повышению микротвердости до 370 ± 6 HV, что, по-видимому, связано с формированием

в тонкой структуре выделений Cu₂Be, препятствующих перемещению дислокаций, и к созданию полей больших напряжений [19; 20]. Дальнейшее увеличение продолжительности времени старения не приводит к заметному изменению величины электропроводности. В данном случае наблюдается баланс между перераспределением легирующих атомов в решетке матрицы, связанным с формированием выделений Cu₂Be, и восстановительными процессами, происходящими в материале.

Стоит отметить, что ИПДК привела к некоторому снижению электропроводности по сравнению с исходным состоянием. Несмотря на то, что в результате ИПДК сформировалась более развитая сетка высокоугловых границ зерен, зернограницный и дислокационный вклады понизили электропроводность. При этом следует учесть возможный вклад в эволюцию электропроводности процесса трансформации малоугловых границ в высокоугловые границы зерен, а также формирования сегрегаций примесных атомов на границах зерен в результате ИПДК.

Рост электропроводности в результате старения УМЗ состояния может быть объяснен, во-первых, тем, что при старении УМЗ состояния происходит более полный распад пересыщенного твердого раствора, высокая плотность дислокаций обеспечивает большое количество мест зарождения и, следовательно, более высокую скорость выделения второй фазы и ее роста. В [13] показано, что при старении после ИПДК происходит выделение стабильной фазы непосредственно из твердого раствора. Выделившаяся фаза не когерентна с матрицей, и, следовательно, электросопротивление сплава в результате старения увеличивается. Увеличение времени выдержки до 5 ч восстанавливает электропроводность до $30,1 \pm 0,6$ % IACS, когда концентрация растворенного вещества в меди приближается к равновесию.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Показано, что в результате проведения ИПДК в сплаве Cu–2 вес. % Be сформировано УМЗ НС состояние со средним размером зерен/субзерен 22 ± 1 нм. Благодаря этому повышается микротвердость с 122 ± 3 до 452 HV, что в 3,7 раза больше по сравнению с исходным состоянием. Последующее старение образцов после ИПДК привело к незначительному увеличению среднего размера зерен/субзерен до 31 ± 1 нм. Однако значение микротвердости возрастает до 525 МПа, что связано с дисперсионным упрочнением. Показано, что в результате ИПДК электропроводность снижается с 17,8 до 14,5 % IACS. Последующее старение УМЗ НС состояния приводит к более высокой скорости восстановления электропроводности и более высоким показателям электропроводности по сравнению с исходным состоянием.

Таким образом, продемонстрировано положительное влияние ИПДК и последующего старения на формирование в сплаве Cu–2 вес. % Be УМЗ НС состояния, характеризующегося максимально высокими значениями электропроводности $27,5 \pm 0,6$ % IACS и микротвердости 525 ± 8 HV.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Montecinos S., Tognana S., Gonzalez C., Salgueiro W. Influence of the load on the elastic modulus determined from nanoindentation measurements in a Cu-2Be alloy with different microstructures // *Engineering Research Express*. 2021. Vol. 3. Article number 035025. DOI: [10.1088/2631-8695/ac1a5b](https://doi.org/10.1088/2631-8695/ac1a5b).
- Zinkle S.J. Evaluation of high strength, high conductivity CuNiBe alloys for fusion energy applications // *Journal of Nuclear Materials*. 2014. Vol. 449. № 1-3. P. 277–289. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2013.09.007](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.09.007).
- Zhou Y.J., Song K.X., Xing J.D., Zhang Y.M. Precipitation behavior and properties of aged Cu-0.23Be-0.84Co alloy // *Journal of Alloys and Compounds*. 2016. Vol. 658. P. 920–930. DOI: [10.1016/j.jallcom.2015.10.290](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.10.290).
- Мысик Р.К., Логинов Ю.Н., Сулицин А.В. Литье и обработка бронз со специальными свойствами. Екатеринбург: УГТУ, 2008. 312 с. EDN: [VRKUKV](https://www.vrkukv.ru).
- Jen K.P., Xu L., Hylinski S., Gildersleeve N. Overaging effect on fracture toughness of beryllium copper alloy C17200 // *Journal of Materials Engineering and Performance*. 2008. Vol. 17. № 5. P. 714–724. DOI: [10.1007/s11665-007-9193-1](https://doi.org/10.1007/s11665-007-9193-1).
- Khachaturyan A.G., Laughlin D.E. Structural transformations during decomposition in CuBe alloys // *Acta Metallurgica Et Materialia*. 1990. Vol. 38. № 10. P. 1823–1835. DOI: [10.1016/0956-7151\(90\)90294-Q](https://doi.org/10.1016/0956-7151(90)90294-Q).
- Koo Y.M., Cohen J.B. The structure of GP zones in Cu-10.9 at.% Be // *Acta metallurgica*. 1989. Vol. 37. № 5. P. 1295–1306. DOI: [10.1016/0001-6160\(89\)90159-4](https://doi.org/10.1016/0001-6160(89)90159-4).
- Zhang H., Jiang Y., Xie J., Li Y., Yue L. Precipitation behavior, microstructure and properties of aged Cu-1.7 wt% Be alloy // *Journal of Alloys and Compounds*. 2019. Vol. 773. P. 1121–1130. DOI: [10.1016/j.jallcom.2018.09.296](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.09.296).
- Zhang W., Zhao Z., Fang J., He P., Chao Z., Gong D., Chen G., Jiang L. Evolution and strengthening mechanism of metastable precipitates in Cu-2.0 wt% Be alloy // *Journal of Alloys and Compounds*. 2021. Vol. 857. Article number 157601. DOI: [10.1016/j.jallcom.2020.157601](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.157601).
- Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V. Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation // *Progress in Materials Science*. 2000. Vol. 45. № 2. P. 103–189. DOI: [10.1016/S0079-6425\(99\)00007-9](https://doi.org/10.1016/S0079-6425(99)00007-9).
- Murashkin M.Y., Sabirov I., Sauvage X., Valiev R.Z. Nanostructured Al and Cu alloys with superior strength and electrical conductivity // *Journal of Materials Science*. 2016. Vol. 51. № 1. P. 33–49. DOI: [10.1007/s10853-015-9354-9](https://doi.org/10.1007/s10853-015-9354-9).
- Sabirov I., Enikeev N., Murashkin M., Valiev R. Bulk Nanostructured Materials with Multifunctional Properties. Heidelberg: Springer, 2015. 118 p. DOI: [10.1007/978-3-319-19599-5](https://doi.org/10.1007/978-3-319-19599-5).
- Lomakin I., Castillo-Rodriguez M., Sauvage X. Microstructure, mechanical properties and aging behaviour of nanocrystalline copper-beryllium alloy // *Materials Science and Engineering A*. 2019. Vol. 744. P. 206–214. DOI: [10.1016/j.msea.2018.12.011](https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.12.011).
- Lomakin I., Nigmatullina A., Sauvage X. Mechanism of large strain accommodation assisted by shear localization in a precipitation-hardened Cu–Be alloy // *Materials Science and Engineering A*. 2021. Vol. 823. Article number 141760. DOI: [10.1016/j.msea.2021.141760](https://doi.org/10.1016/j.msea.2021.141760).
- Tang Y.Ch., Kang Y.L., Yue L.J., Xiao-Liang J. Precipitation behavior of Cu-1.9Be-0.3Ni-0.15Co alloy during aging // *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*. 2015. Vol. 28. № 3. P. 307–315. DOI: [10.1007/s40195-014-0198-0](https://doi.org/10.1007/s40195-014-0198-0).
- Watanabe C., Monzen R., Ii S., Tsuchiya K. Microstructure and aging behavior of Cu-Be alloy processed by high-pressure torsion // *Materials Science Forum*. 2014. Vol. 783-786. P. 2707–2712. DOI: [10.4028/www.scientific.net/MSF.783-786.2707](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.783-786.2707).
- Hillel G., Meshi L., Shimon S., Kalabukhov S., Frage N., Zaretsky E.B. Shock wave study of precipitation hardening of beryllium copper // *Materials Science and Engineering A*. 2022. Vol. 834. Article number 142599. DOI: [10.1016/j.msea.2022.142599](https://doi.org/10.1016/j.msea.2022.142599).
- Kızılaslan A., Altınsoy İ. The mechanism of two-step increase in hardness of precipitation hardened CuCoNiBe alloys and characterization of precipitates // *Journal of Alloys and Compounds*. 2017. Vol. 701. P. 116–121. DOI: [10.1016/j.jallcom.2017.01.101](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.101).
- Guoliang X., Qiangsong W., Xujun M., Baiqing X., Lijun P. The precipitation behavior and strengthening of a Cu–2.0 wt% Be alloy // *Materials Science and Engineering A*. 2012. Vol. 558. P. 326–330. DOI: [10.1016/j.msea.2012.08.007](https://doi.org/10.1016/j.msea.2012.08.007).
- Huang X., Xie G., Liu X., Fu H., Shao L., Hao Z. The influence of precipitation transformation on Young's modulus and strengthening mechanism of a Cu–Be binary alloy // *Materials Science and Engineering A*. 2020. Vol. 772. Article number 138592. DOI: [10.1016/j.msea.2019.138592](https://doi.org/10.1016/j.msea.2019.138592).

REFERENCES

- Montecinos S., Tognana S., Gonzalez C., Salgueiro W. Influence of the load on the elastic modulus determined from nanoindentation measurements in a Cu-2Be alloy with different microstructures. *Engineering Research Express*, 2021, vol. 3, article number 035025. DOI: [10.1088/2631-8695/ac1a5b](https://doi.org/10.1088/2631-8695/ac1a5b).
- Zinkle S.J. Evaluation of high strength, high conductivity CuNiBe alloys for fusion energy applications. *Journal of Nuclear Materials*, 2014, vol. 449, no. 1-3, pp. 277–289. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2013.09.007](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.09.007).
- Zhou Y.J., Song K.X., Xing J.D., Zhang Y.M. Precipitation behavior and properties of aged Cu-0.23Be-0.84Co alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, 2016, vol. 658, pp. 920–930. DOI: [10.1016/j.jallcom.2015.10.290](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.10.290).
- Мысик Р.К., Логинов Ю.Н., Сулицин А.В. *Литье и обработка бронз со специальными свойствами* [Casting and processing of bronzes with special properties]. Екатеринбург, УГТУ Publ., 2008. 312 p. EDN: [VRKUKV](https://www.vrkukv.ru).
- Jen K.P., Xu L., Hylinski S., Gildersleeve N. Overaging effect on fracture toughness of beryllium copper alloy C17200. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2008, vol. 17, no. 5, pp. 714–724. DOI: [10.1007/s11665-007-9193-1](https://doi.org/10.1007/s11665-007-9193-1).
- Khachaturyan A.G., Laughlin D.E. Structural transformations during decomposition in CuBe alloys. *Acta*

- Metallurgica Et Materialia*, 1990, vol. 38, no. 10, pp. 1823–1835. DOI: [10.1016/0956-7151\(90\)90294-Q](https://doi.org/10.1016/0956-7151(90)90294-Q).
7. Koo Y.M., Cohen J.B. The structure of GP zones in Cu-10.9 at.% Be. *Acta metallurgica*, 1989, vol. 37, no. 5, pp. 1295–1306. DOI: [10.1016/0001-6160\(89\)90159-4](https://doi.org/10.1016/0001-6160(89)90159-4).
 8. Zhang H., Jiang Y., Xie J., Li Y., Yue L. Precipitation behavior, microstructure and properties of aged Cu-1.7 wt% Be alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, vol. 773, pp. 1121–1130. DOI: [10.1016/j.jallcom.2018.09.296](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.09.296).
 9. Zhang W., Zhao Z., Fang J., He P., Chao Z., Gong D., Chen G., Jiang L. Evolution and strengthening mechanism of metastable precipitates in Cu-2.0 wt% Be alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, 2021, vol. 857, article number 157601. DOI: [10.1016/j.jallcom.2020.157601](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.157601).
 10. Valiev R.Z., Islamgaliev R.K., Alexandrov I.V. Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation. *Progress in Materials Science*, 2000, vol. 45, no. 2, pp. 103–189. DOI: [10.1016/S0079-6425\(99\)00007-9](https://doi.org/10.1016/S0079-6425(99)00007-9).
 11. Murashkin M.Y., Sabirov I., Sauvage X., Valiev R.Z. Nanostructured Al and Cu alloys with superior strength and electrical conductivity. *Journal of Materials Science*, 2016, vol. 51, no. 1, pp. 33–49. DOI: [10.1007/s10853-015-9354-9](https://doi.org/10.1007/s10853-015-9354-9).
 12. Sabirov I., Enikeev N., Murashkin M., Valiev R. *Bulk Nanostructured Materials with Multifunctional Properties*. Springer, 2015. 118 p. DOI: [10.1007/978-3-319-19599-5](https://doi.org/10.1007/978-3-319-19599-5).
 13. Lomakin I., Castillo-Rodriguez M., Sauvage X. Microstructure, mechanical properties and aging behaviour of nanocrystalline copper-beryllium alloy. *Materials Science and Engineering A*, 2019, vol. 744, pp. 206–214. DOI: [10.1016/j.msea.2018.12.011](https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.12.011).
 14. Lomakin I., Nigmatullina A., Sauvage X. Mechanism of large strain accommodation assisted by shear localization in a precipitation-hardened Cu–Be alloy. *Materials Science and Engineering A*, 2021, vol. 823, article number 141760. DOI: [10.1016/j.msea.2021.141760](https://doi.org/10.1016/j.msea.2021.141760).
 15. Tang Y.Ch., Kang Y.L., Yue L.J., Xiao-Liang J. Precipitation behavior of Cu-1.9Be-0.3Ni-0.15Co alloy during aging. *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*, 2015, vol. 28, no. 3, pp. 307–315. DOI: [10.1007/s40195-014-0198-0](https://doi.org/10.1007/s40195-014-0198-0).
 16. Watanabe C., Monzen R., Ii S., Tsuchiya K. Microstructure and aging behavior of Cu-Be alloy processed by high-pressure torsion. *Materials Science Forum*, 2014, vol. 783-786, pp. 2707–2712. DOI: [10.4028/www.scientific.net/MSF.783-786.2707](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.783-786.2707).
 17. Hillel G., Meshi L., Shimon S., Kalabukhov S., Frage N., Zaretsky E.B. Shock wave study of precipitation hardening of beryllium copper. *Materials Science and Engineering A*, 2022, vol. 834, article number 142599. DOI: [10.1016/j.msea.2022.142599](https://doi.org/10.1016/j.msea.2022.142599).
 18. Kızılaslan A., Altınsoy İ. The mechanism of two-step increase in hardness of precipitation hardened CuCoNiBe alloys and characterization of precipitates. *Journal of Alloys and Compounds*, 2017, vol. 701, pp. 116–121. DOI: [10.1016/j.jallcom.2017.01.101](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.101).
 19. Guoliang X., Qiangsong W., Xujun M., Baiqing X., Lijun P. The precipitation behavior and strengthening of a Cu–2.0 wt% Be alloy. *Materials Science and Engineering A*, 2012, vol. 558, pp. 326–330. DOI: [10.1016/j.msea.2012.08.007](https://doi.org/10.1016/j.msea.2012.08.007).
 20. Huang X., Xie G., Liu X., Fu H., Shao L., Hao Z. The influence of precipitation transformation on Young's modulus and strengthening mechanism of a Cu–Be binary alloy. *Materials Science and Engineering A*, 2020, vol. 772, article number 138592. DOI: [10.1016/j.msea.2019.138592](https://doi.org/10.1016/j.msea.2019.138592).

The influence of aging on microhardness and electrical conductivity of Cu–2 wt. % Be alloy

© 2022

Liliya I. Zaynullina^{*1}, senior lecturer of Chair of Materials Science and Physics of Metals

Elena A. Sarkeeva², senior lecturer of Chair of Materials Science and Physics of Metals

Igor V. Alexandrov³, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,
professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals

Ruslan Z. Valiev⁴, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,
professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals

Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

*E-mail: ZaynullinaLI@yandex.ru

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6116-1535>

²ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0357-8161>

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4789-4713>

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4340-4067>

Received 04.05.2022

Accepted 28.07.2022

Abstract: Goods made of beryllium bronzes got widespread use in the industry due to the complex of properties: high heat conductivity, strength, hardness, wear resistance, and corrosion resistance. They are not magnesium-based and do not spark on impact; therefore, they are essential for the production of non-sparking tools. The alloys of this system are used in the electrical engineering industry; consequently, it is necessary to pay attention to the improvement of the material's electrical conductivity. The paper studies the microstructure, microhardness, and electrical conductivity of the Cu–2 wt.% Be alloy exposed to high-pressure torsion (HPT). The authors investigated the microstructure and fine structure of the alloy in various states. The study showed that HPT leads to the formation of an ultrafine-grained nanostructured (UFG NS) state with an average size of grains/subgrains of 22±1 nm. Additional ageing of samples after HPD led to a slight increase in

the grains/subgrains size up to 31 ± 1 nm. In both states, the authors observed nanosized deformation twins. The authors studied the dependences of microhardness and electrical conductivity of the alloy after HPD on the time of further ageing. The study identified that the microhardness increases from 122 ± 3 HV in the initial state up to 525 ± 8 HV after HPD and ageing. The investigation shows that the electrical conductivity substantially better recovers after ageing of the UFG NS state compared to the initial state. The electrical conductivity of the UFG NS state increased from 14.5 ± 0.1 % IACS up to 27.5 ± 0.6 % IACS in conditions similar to the initial state ageing. Therefore, resulting from such processing, the Cu–2 wt.% Be alloy is characterized by its advanced strength properties and electrical conductivity.

Keywords: HPT; beryllium bronze; electrical conductivity; nanostructure.

Acknowledgements: The work was carried out under the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the project No. 0838-2020-0006 “Fundamental research of new principles of creation of the advanced electromechanical energy converters with the characteristics higher than the international standards with the improved efficiency and minimum specific indicators with the use of new high-performance electrotechnical materials”.

For citation: Zaynullina L.I., Sarkeeva E.A., Alexandrov I.V., Valiev R.Z. The influence of aging on microhardness and electrical conductivity of Cu–2 wt. % Be alloy. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 69–75. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-69-75.

Моделирование преодоления препятствий в виде пор дислокациями в вольфраме

© 2022

Казаков Арсений Максимович^{*1,5}, студент
Шарапова Юлия Равильевна¹, научный сотрудник
Бабичева Рита Исмагиловна^{2,6}, кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник школы машиностроения и аэрокосмической инженерии
Зиновьев Александр Викторович^{3,7}, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник
Терентьев Дмитрий Александрович³, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник
Семенов Александр Сергеевич^{4,8}, кандидат физико-математических наук, доцент

¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

²Наньянский технологический университет, Сингапур (Сингапур)

³Бельгийский центр ядерных исследований, Мол (Бельгия)

⁴Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Мирный (Россия)

*E-mail: arseny.m.kazakov@gmail.com

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8278-8705>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5388-3466>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1332-5125>

⁸ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

Поступила в редакцию 27.04.2022

Принята к публикации 14.07.2022

Аннотация: Вольфрам широко используется в качестве материала, способного выдержать условия работы в ядерных реакторах и других экстремальных условиях. Под воздействием облучения в металле образуются такие дефекты, как пары Френкеля, поры и дислокационные петли. Поэтому важными на сегодняшний день являются исследования, направленные на изучение взаимодействий этих дефектов друг с другом и влияния данных взаимодействий на механические свойства металла. В статье представлено теоретическое исследование, основанное на методе молекулярной динамики, целью которого является изучение механизма деформационного упрочнения вольфрама, связанного с взаимодействием дислокаций с порами. Решение данной задачи получено с использованием пакета LAMMPS. Интегрирование уравнений движений атомов проводится методом Верле четвертого порядка. Исследуемая модель представляет собой монокристалл ориентации [111], [−1−12], [1−10] вдоль основных координатных осей X, Y, Z соответственно, в котором рассматривается скольжение краевых дислокаций в основной системе скольжения металлов с объемно-центрированной кубической кристаллической решеткой и их взаимодействие с порами. Изучено влияние размера пор на величину сдвигающего напряжения: рост диаметра поры пропорционален росту напряжения. Рассчитаны зависимости сдвигающего напряжения от деформации сдвига в интервале температур 600–1400 К, причем изменение температуры не оказывает значительного влияния на величину напряжения. Показано, что дислокации перерезают поры, и при повторном взаимодействии с порой наблюдается меньшее значение пикового сдвигающего напряжения, чем при первом. Присутствие пор приводит к повышению напряжения течения, причем данный эффект становится более заметным с ростом диаметра пор. Для материала с порами диаметром 6 нм напряжение течения возросло в три раза по сравнению с материалом без пор. Описан механизм взаимодействия краевых дислокаций и пор под воздействием сдвигающего напряжения.

Ключевые слова: вольфрам; метод молекулярной динамики; поры; дислокации; взаимодействие дефектов; сдвиговая деформация.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УГАТУ» (соглашение № 075-03-2022-318/1) «Молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» для А.В. Зиновьева (проведение расчетов), гранта № НШ-4320.2022.1.2 для А.М. Казакова (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ № 21-12-00275 для А.С. Семенова (постановка задачи, концептуализация исследования).

Для цитирования: Казаков А.М., Шарапова Ю.Р., Бабичева Р.И., Зиновьев А.В., Терентьев Д.А., Семенов А.С. Моделирование преодоления препятствий в виде пор дислокациями в вольфраме // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 76–84. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-76-84.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема выбора и разработки материалов для ядерной энергетики остается актуальной. Выбор таких материалов определяется их физическими, химическими, механическими свойствами. Вольфрам – один из перспективных материалов, который может быть при-

менен в различных установках для ядерных и термо-ядерных реакторов. Разработка и выбор передовых материалов естественным образом обусловлены необходимостью увеличения диапазона рабочих температур и флюенса, что позволит расширить возможности проведения современных экспериментальных исследований. Например, в обзорной статье [1] авторы обсуждают

возможность использования вольфрама как обращенно-го к плазме материала термоядерных установок и пути устранения недостатков вольфрама, таких как высокая температура перехода из хрупкого состояния в пластическое, радиационное охрупчивание и др. Под воздействием облучения в материале накапливаются радиационные повреждения, образуются полости и другие дефекты на различной глубине [2]. Кроме того, авторами работы [3] получена зависимость плотности и размера пор от температуры и дозы облучения.

Помимо пор, при облучении в металлах могут образовываться дислокационные петли даже при относительно небольших дозах [4; 5]. Взаимодействие дислокаций с дислокационными петлями также представляет особый интерес, поскольку такие процессы влияют на теплофизические и механические характеристики материалов для ядерных реакторов. Исследования по этой теме были представлены для железа и сплавов на его основе, причем основной вклад в упрочнение при высокой температуре облучения вносят поры, в то время как дислокационные петли обеспечивают сопоставимый вклад (30–50 %) только при облучении при 600 °С [6–8]. При интенсивном облучении вольфрамовый материал разрушается в результате многократного распухания и отслаивания вблизи поверхности. Даже если разрушение материала не наблюдается, облученные микроструктуры изменяют механические свойства материала из-за взаимодействия дислокаций и дефектов, что приводит к множеству проблем, таких как упрочнение, распухание, ползучесть при облучении, охрупчивание и т. д. Изучение отдельных радиационных дефектов представляет большой интерес. Например, решетка радиационных полостей, образованная периодическим расположением пустот, обычно повторяет симметрию и кристаллографическую ориентацию кристаллической решетки [7].

Хорошо изучено взаимодействие дислокаций с когерентными и некогерентными частицами в металлах. При взаимодействии дислокации с частицами его механизм определяется размером самой частицы [9]. Когда диаметр частиц небольшой, для дислокации энергетически выгодно перерезать частицу, в особенности, если она когерентна матрице. С увеличением размера частицы дислокации становится более выгодно огибать препятствие, при этом образуются так называемые кольца Орована. Однако при взаимодействии дислокации с полостями должны работать другие механизмы. Возникает вопрос, как именно протекает пластическая деформация в материалах с порами.

В связи с этим актуальными являются численные исследования, которые можно проводить без масштабных экспериментов. Традиционно влияние облучения на механические свойства материалов оценивается с помощью испытаний на растяжение предварительно облученных образцов при различных дозах и температурах. С точки зрения моделирования существуют методы, которые описывают облучение и деформацию как отдельные процессы, причем первый основан на теории кинетического переноса, а второй – на теории кристаллической пластичности. Еще один метод – *ab initio* моделирование – используется для оценки взаимодействия типичных примесей с межузельными атомами, дислокационными петлями и краевыми дислокациями

в вольфраме. Такие примеси присутствуют в коммерческих сортах вольфрама, а также образуются в результате трансмутации нейтронов или процесса поглощения плазмы [8]. Данное исследование расширит наши представления о том, каков механизм деформационного упрочнения вольфрама с порами и как присутствие пор влияет на механические свойства радиационно поврежденного металла.

Цель работы – моделирование взаимодействия краевой дислокации с порами.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве основного метода исследования был использован метод молекулярной динамики, который ранее зарекомендовал себя как эффективный инструмент анализа различных аспектов трансформации структуры кристаллических решеток в результате внешних воздействий, в том числе при изучении дефектов краудинонного типа [10–12], устойчивости к нагреву нанокристаллов, армированных углеродными нанотрубками [13], анализе деформационно индуцированных фазовых переходов [14], формоизменения кристаллов в результате внешних электромагнитных воздействий [15] и многих других.

В качестве модели, иллюстрирующей взаимодействие дислокации с препятствиями, была выбрана методика под названием «Периодический массив дислокаций». Выбор обусловлен удобством использования периодических граничных условий, которые в данной работе накладывались по всем трем направлениям. Это, в свою очередь, позволяет изучить динамику дислокаций при ненулевых температурах [16]. Существуют альтернативные формулировки проблемы, когда в расчетный блок вводится одна дислокация и по части поверхности накладываются жесткие граничные условия [17]. В аналогичной постановке подобная задача решалась для объемно-центрированной кубической кристаллической решетки железа [18].

Моделирование проводилось с использованием пакета LAMMPS и многочастичного межатомного потенциала для вольфрама [19]. Для визуализации результатов использовалась программа OVITO (Open Visualization Tools). Ранее данное программное обеспечение неоднократно использовалось для моделирования экстремальных воздействий в решетках металлов и сплавов, включая такие динамические дефекты, как краудиноны и воидиноны – внедренные в плотноупакованный ряд межузельные дефекты, которые могут обеспечить высокую скорость массопереноса в металлах [20–23]. При этом важно отметить, что качественно результаты совпадают с молекулярно-динамическими расчетами, выполненными с использованием самостоятельно написанных кодов [24; 25] и первопринципных расчетов [26].

Вольфрам – ОЦК металл с параметром решетки $a=3,160 \text{ \AA}$. Основная система скольжения в ОЦК металлах – $\{110\}\langle -111 \rangle$. Координатные оси кристалла X , Y , Z ориентированы вдоль $[111]$, $[-1-12]$ и $[1-10]$ соответственно. Таким образом, плоскость скольжения параллельна плоскости XZ , а направление скольжения совпадает с осью X . Изначально прямолинейная краевая дислокация расположена вдоль оси Z . Размер исходной

ячейки – $L_x \times L_y \times L_z = 274 \times 224 \times 116 \text{ \AA}$ (содержит примерно 450 тысяч атомов). Вектор Бюргерса краевой дислокации равен $\frac{1}{2} [111]$. Сдвиговая деформация γ возрастала со скоростью деформации 10^9 с^{-1} . Для интегрирования уравнений движения атомов использовался метод Верле четвертого порядка с шагом интегрирования 2 фс.

Моделирование проводилось для пор различного диаметра (0,5, 1, 2, 4, 6 нм) и для различных температур (600, 800, 1000, 1200, 1400 К), при которых совершалась пластическая деформация. Моделирование начиналось с создания ячейки заданного размера и определенной ориентацией в пакете LAMMPS.

Затем с помощью OVITO получалась идеальная структура путем варьирования размера ячейки так, чтобы в ячейке все атомы имели координационное число, равное 8. Чтобы получить пару прямолинейных краевых дислокаций с координатами $X, Y = L_x/2, L_y/4$ и $X, Y = L_x/2, Y = 3L_y/4$, в расчетной ячейке удалялись части атомных плоскостей прямоугольной формы. Затем добавлялись две поры заданного диаметра, расположенные на плоскостях скольжения дислокаций. Координаты первой поры ($L_x/4, L_y/4, L_z/2$), второй поры – ($3L_x/4, 3L_y/4, L_z/2$).

После того, как были добавлены дефекты, проводилась релаксация структуры с использованием термодинамического ансамбля NPT, в процессе которой исходные дислокации расщеплялись на две частичные дислокации. Дислокации в результате релаксации оказались на порах, как показано на рис. 1, где представлена исходная равновесная структура при нулевой деформации. Затем прикладывалась сдвигающая деформация γ при использовании термодинамического ансамбля NVE.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В результате приложения монотонно увеличивающейся сдвиговой деформации γ дислокации начинали двигаться в поле сдвигающего напряжения. Итоги моделирования позволяют получить зависимости «напря-

жение – деформация» и изучить механизм взаимодействия поры и дислокации.

На рис. 2 и 3 показаны зависимости сдвигающего напряжения от деформации для различных диаметров пор при $T=600 \text{ К}$ и для различных температур при диаметре пор 4 нм соответственно.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

С помощью OVITO был изучен механизм взаимодействия дислокаций с порами. С повышением сдвигающего напряжения дислокации начинают выгибаться, затем происходит их отрыв от поры, и дислокации бегут к следующим порам, видоизменяясь в процессе перемещения (рис. 4). После этого дислокации снова встречаются с порами. Рассмотрена сдвиговая деформация до величины $\gamma=0,03$, за это время дислокации успевают два раза преодолеть пору. При рассмотрении поры после отрыва дислокации заметно, что дислокация перерезает препятствие (рис. 5).

На рис. 2 видно, что величина напряжения с увеличением γ сначала растет линейно. Для пор большого диаметра (2, 4 и 6 нм) наблюдается два максимума на кривых «напряжение – деформация». Они соответствуют моментам отрыва дислокации от поры. Второй максимум кривой напряжения ниже первого, потому что пора уже перерезана на величину одного вектора Бюргерса. При увеличении диаметра поры напряжение, необходимое для ее преодоления, увеличивается пропорционально диаметру поры как для первых максимумов, так и для последующих. При диаметре пор $D > 1 \text{ нм}$ величина деформации, необходимая для отрыва дислокации, растет линейно.

Для пор диаметра 1 нм и менее характер зависимостей напряжения от γ практически одинаков как для ячеек с порами, так и без пор, наблюдается лишь небольшое повышение уровня напряжений с ростом диаметра пор. Для преодоления поры в первый раз для этих случаев достаточно деформации $\gamma=0,007$. Осциллирующий характер зависимости, по-видимому связан с наличием барьера

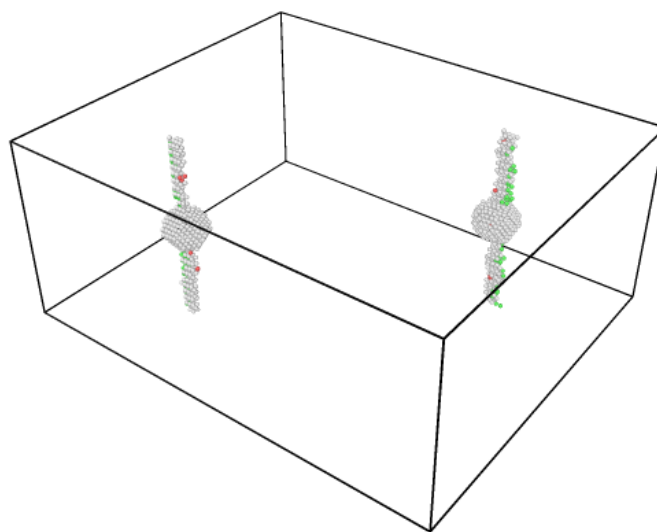


Рис. 1. Стартовое положение дислокаций и пор. $D=2 \text{ нм}$, $T=600 \text{ К}$
 Fig. 1. The starting position of dislocations and pores. $D=2 \text{ nm}$, $T=600 \text{ K}$

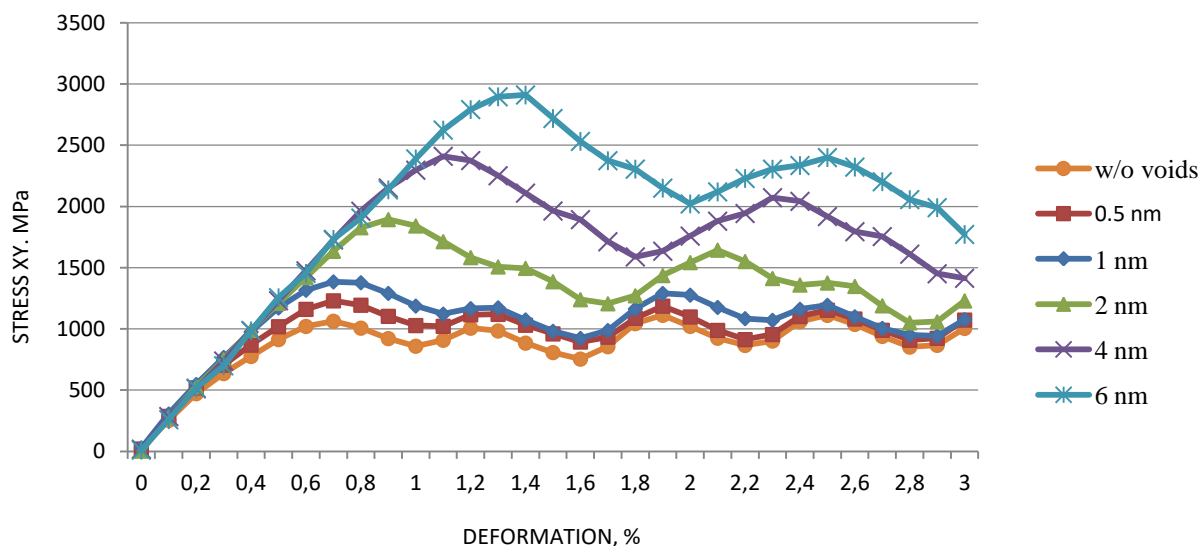


Рис. 2. Зависимость сдвигающего напряжения от деформации γ для различных диаметров пор от 0,5 до 6 нм при температуре $T=600$ К

Fig. 2. The dependence of shear stress on γ deformation for various pore diameters from 0.5 to 6 nm at the temperature of $T=600$ K

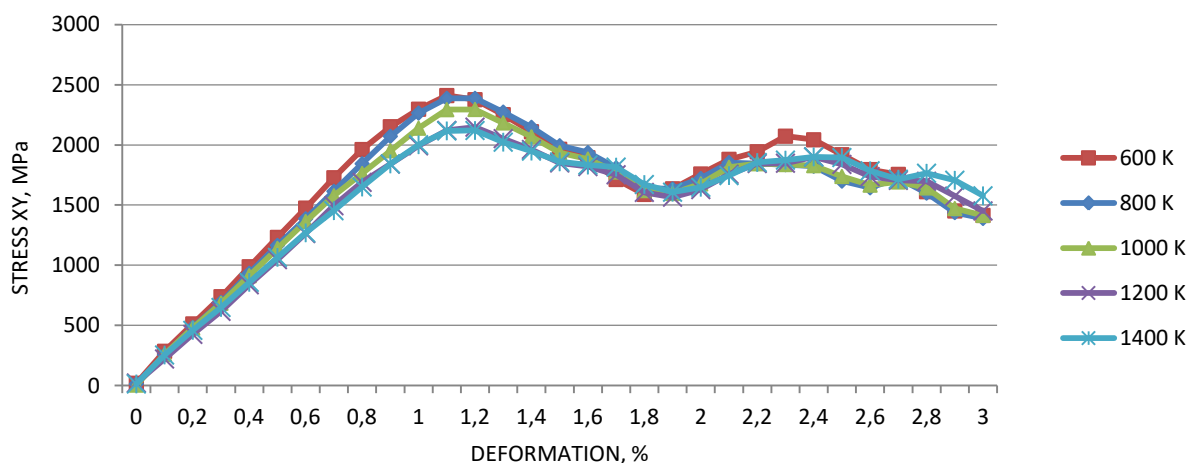


Рис. 3. Зависимость сдвигающего напряжения от деформации γ для различных температур от 600 до 1400 К при диаметре пор $D=4$ нм

Fig. 3. The dependence of shear stress on γ deformation γ for various temperatures from 600 to 1400 K with a pore diameter of $D=4$ nm

Пайерлса – Набарро, преодоление которого дислокациями происходит с образованием кинков, которые отчетливо видны в процессе всего эксперимента (рис. 6).

На рис. 3 отражена зависимость сдвигающего напряжения от γ при одинаковом диаметре поры (4 нм) при различных температурах. С увеличением температуры величина напряжения течения уменьшается, однако при температурах 1200 и 1400 К уже практически не меняется по значению. Величина сдвигающей деформации, необходимой для отрыва дислокаций от пор, слабо зависит от температуры и примерно равна $\gamma=0,011$.

Важно учесть, что данные зависимости (рис. 2 и 3) не учитывают напряжение трения, так как в [27] показано, что при моделировании с температурой выше 100 К оно почти исчезает.

Авторы планируют провести аналогичные исследования для ячейки большего размера, рассмотреть влияние скорости деформации и расстояния между порами на величину напряжения течения, а также изучить взаимодействие дислокаций и дислокационных петель в поликристаллической модели ОЦК решетки вольфрама.

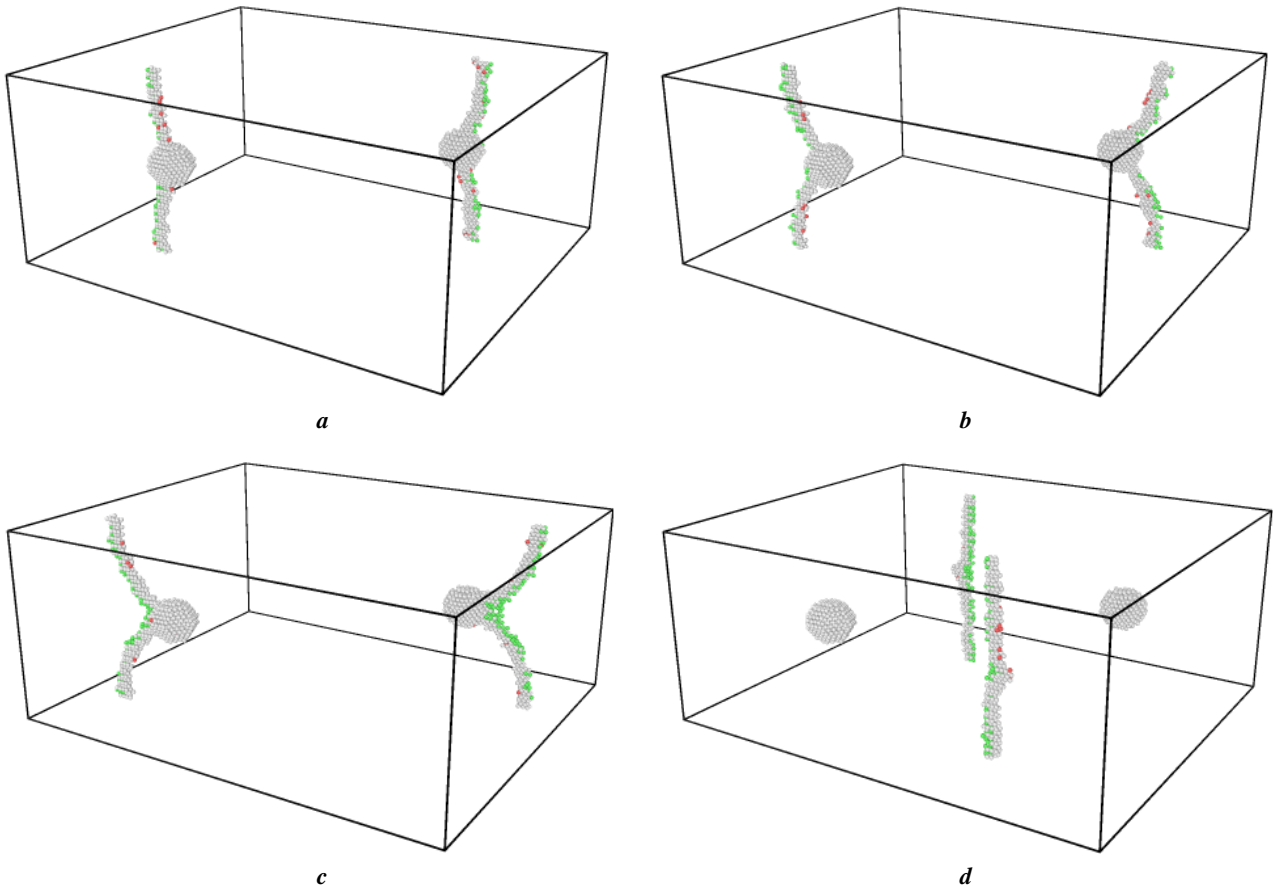


Рис. 4. Визуализация процесса преодоления пор дислокациями. Показаны только атомы с координационным числом, отличным от 8, которые располагаются вблизи дефектов. Выгибание (a, b, c) и отрыв (d) дислокаций. $D=2$ нм, $T=600$ К
Fig. 4. Visualization of the process of overcoming pores by dislocations. Only atoms with a coordination number other than 8 that are located near defects are shown. Flexion (a, b, c) and separation (d) of dislocations. $D=2$ nm, $T=600$ K

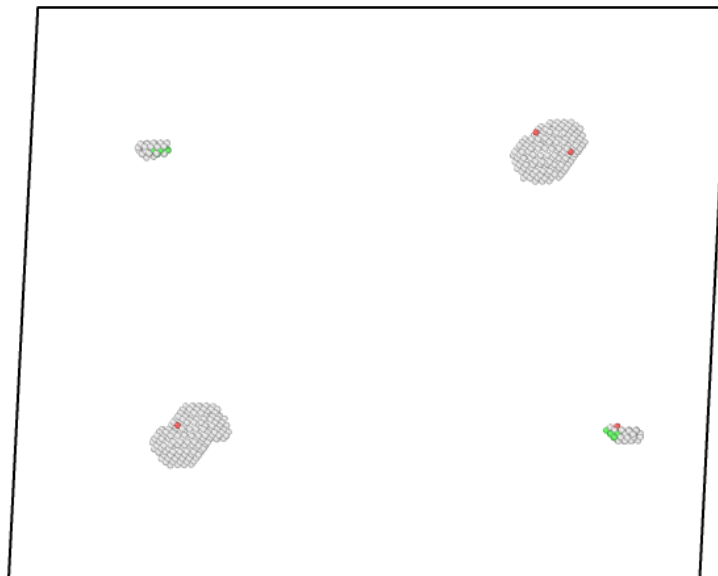


Рис. 5. Поры после прохождения через них дислокаций. Видно, что дислокации перерезают поры. $D=2$ нм, $T=600$ К, $\gamma=0,03$
Fig. 5. Pores after dislocations pass through them. It can be seen that dislocations intersect the pores. $D=2$ nm, $T=600$ K, $\gamma=0.03$

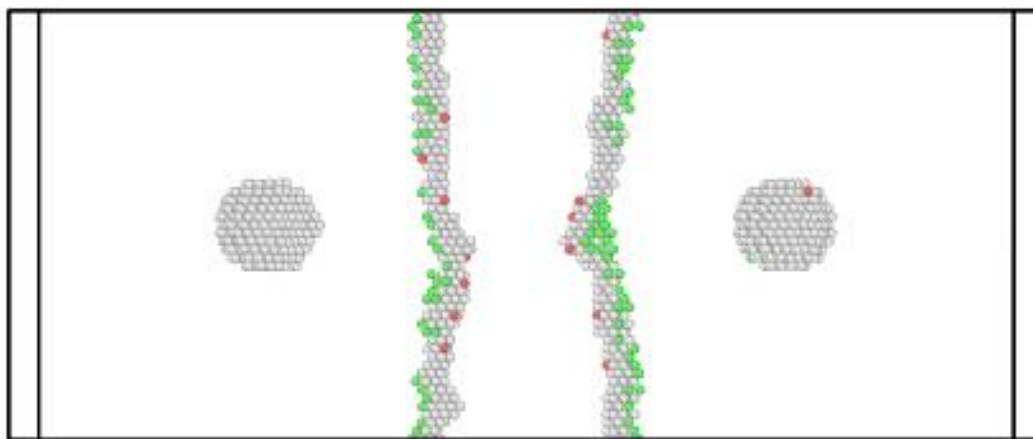


Рис. 6. Кинки на частичных дислокациях. $D=2$ нм, $T=600$ К
 Fig. 6. Kinks on partial dislocations. $D=2$ nm, $T=600$ K

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

С помощью моделирования изучен механизм взаимодействия дислокаций с порами и показано, что дислокации перерезают поры. Полученные зависимости «напряжение – деформация» демонстрируют, что температура в исследованном интервале слабо влияет на сдвиговое напряжение, достаточное для преодоления препятствия, а увеличение диаметра поры приводит к росту сдвигающего напряжения и сдвигающей деформации по закону, близкому к линейному.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Голубева А.В., Черкез Д.И. Накопление водорода в разработанных для термоядерных установок сплавах вольфрама (обзор) // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. 2018. Т. 41. № 4. С. 26–37. DOI: [10.21517/0202-3822-2018-41-4-26-37](https://doi.org/10.21517/0202-3822-2018-41-4-26-37).
2. Хрипунов Б.И., Койдан В.С., Рязанов А.И., Гурев В.М., Корниенко С.Н., Латушкин С.Т., Муксунов А.М., Семенов Е.В., Столярова В.Г., Унежев В.Н. Радиационно-поврежденный вольфрам: получение и исследование в потоке стационарной плазмы // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. 2017. Т. 40. № 4. С. 40–49. DOI: [10.21517/0202-3822-2017-40-4-40-49](https://doi.org/10.21517/0202-3822-2017-40-4-40-49).
3. Ipatova I., Harrison R.W., Donnelly S.E., Rushton M.J.D., Middleburgh S.C., Jimenez-Melero E. Void evolution in tungsten and tungsten-5wt.% tantalum under in-situ proton irradiation at 800 and 1000 °C // Journal of Nuclear Materials. 2019. Vol. 526. Article number 151730. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2019.07.030](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.07.030).
4. Masters B.C. Dislocation loops in irradiated iron // Philosophical Magazine. 1965. Vol. 11. № 113. P. 881–893. DOI: [10.1080/14786436508223952](https://doi.org/10.1080/14786436508223952).
5. Muroga T., Watanabe H., Yoshida N. Correlation of fast neutron, fusion neutron and electron irradiations based on the dislocation loop density // Journal of Nuclear Materials. 1990. Vol. 174. № 2-3. P. 282–288. DOI: [10.1016/0022-3115\(90\)90241-E](https://doi.org/10.1016/0022-3115(90)90241-E).
6. Jumel S., Van Duysen J.-C., Ruste J., Domain C. Interactions between dislocations and irradiation-induced defects in light water reactor pressure vessel steels // Journal of Nuclear Materials. 2005. Vol. 346. № 2-3. P. 79–97. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2005.04.065](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2005.04.065).
7. Rong Z., Osetsky Y.N., Bacon D.J. A model for the dynamics of loop drag by a gliding dislocation // Philosophical Magazine. 2005. Vol. 85. № 14. P. 1473–1493. DOI: [10.1080/14786430500036371](https://doi.org/10.1080/14786430500036371).
8. Osetsky Yu.N. Atomic-scale mechanisms of void strengthening in tungsten // Tungsten. 2021. Vol. 3. № 1. P. 65–71. DOI: [10.1007/s42864-020-00070-6](https://doi.org/10.1007/s42864-020-00070-6).
9. Gerold V. Precipitation Hardening; Dislocations in Solids. Vol. 4. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1979. 219 p.
10. Shepelev I.A., Bayazitov A.M., Korznikova E.A. Modeling of superionic crowdion clusters in FCC lattice: Effect of the interatomic potential // Journal of Micromechanics and Molecular Physics. 2021. Vol. 6. № 1. Article number 2050019. DOI: [10.1142/S2424913020500198](https://doi.org/10.1142/S2424913020500198).
11. Kolesnikov I.D., Shepelev I.A. Excitation and propagation of 1-crowdion in bcc niobium lattice // Materials. Technologies. Design. 2022. Vol. 4. № 1. P. 5–10. DOI: [10.54708/26587572_2022_4175](https://doi.org/10.54708/26587572_2022_4175).
12. Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M.G. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices // Computational Condensed Matter. 2017. Vol. 13. P. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).
13. Янковская У.И., Захаров П.В. Устойчивость к нагреву кристалла платины, армированного углеродными нанотрубками // Materials. Technologies. Design. 2021. Т. 3. № 4. С. 64–67. DOI: [10.54708/26587572_2021_34664](https://doi.org/10.54708/26587572_2021_34664).
14. Chen H.-Y., Tsou N.-T. The Analysis of Thermal-Induced Phase Transformation and Microstructural Evolution in Ni-Ti Based Shape Memory Alloys By Molecular Dynamics // CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences. 2019. Vol. 120. № 2. P. 319–332. DOI: [10.32604/cmcs.2019.06447](https://doi.org/10.32604/cmcs.2019.06447).
15. Yoon T., Kang S., Kang T.Y., Kim T.-S. Detection of Graphene Cracks By Electromagnetic Induction, Insensitive to Doping Level // CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences. 2019. Vol. 120. № 2. P. 351–361. DOI: [10.32604/cmcs.2019.06672](https://doi.org/10.32604/cmcs.2019.06672).

16. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications // *Materials Science Reports*. 1993. Vol. 9. № 7-8. P. 251–310. DOI: [10.1016/0920-2307\(93\)90001-U](https://doi.org/10.1016/0920-2307(93)90001-U).
17. Osetsy Yu.N., Bacon D.J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2003. Vol. 11. № 4. P. 427–440. DOI: [10.1088/0965-0393/11/4/302](https://doi.org/10.1088/0965-0393/11/4/302).
18. Bonny G., Terentyev D., Elena J., Zinovev A., Minov B., Zhurkin E.E. Assessment of hardening due to dislocation loops in bcc iron: Overview and analysis of atomistic simulations for edge dislocations // *Journal of Nuclear Materials*. 2016. Vol. 473. P. 283–289. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2016.02.031](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.02.031).
19. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2004. Vol. 69. № 14. Article number 144113. DOI: [10.1103/physrevb.69.144113](https://doi.org/10.1103/physrevb.69.144113).
20. Shepelev I.A., Dmitriev S.V., Kudreyko A.A., Velarde M.G., Korznikova E.A. Supersonic voidions in 2D Morse lattice // *Chaos, Solitons & Fractals*. 2020. Vol. 140. Article number 110217. DOI: [10.1016/j.chaos.2020.110217](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110217).
21. Shepelev I.A., Korznikova E.A., Bachurin D.V., Semenov A.S., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice // *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*. 2020. Vol. 384. № 1. Article number 126032. DOI: [10.1016/j.physleta.2019.126032](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.126032).
22. Babicheva R.I., Evazzade I., Korznikova E.A., Shepelev I.A., Zhou K., Dmitriev S.V. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact // *Computational Materials Science*. 2019. Vol. 163. P. 248–255. DOI: [10.1016/j.commatsci.2019.03.022](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.03.022).
23. Shepelev I.A., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Dmitriev S.V. Mechanism of remote vacancy emergence by a supersonic crowdion cluster in a 2D Morse lattice // *Chinese Journal of Physics*. 2021. Vol. 70. P. 355–362. DOI: [10.1016/j.cjph.2021.01.010](https://doi.org/10.1016/j.cjph.2021.01.010).
24. Moradi Marjaneh A.M., Saadatmand D., Evazzade I., Babicheva R., Soboleva E.G., Srikanth N., Zhou K., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Mass transfer in the Frenkel-Kontorova chain initiated by molecule impact // *Physical Review E*. 2018. Vol. 98. № 2. Article number 023003. DOI: [10.1103/PhysRevE.98.023003](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.023003).
25. Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain // *Journal of Nonlinear Science*. 2021. Vol. 31. № 1. Article number 12. DOI: [10.1007/s00332-020-09663-4](https://doi.org/10.1007/s00332-020-09663-4).
26. Korznikova E., Shunaev V.V., Shepelev I.A., Glukhova O.E., Dmitriev S.V. Ab initio study of the propagation of a supersonic 2-crowdion in fcc Al // *Computational Materials Science*. 2022. Vol. 204. Article number 111125. DOI: [10.1016/j.commatsci.2021.111125](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.111125).
27. Terentyev D., Malerba L., Bacon D.J., Osetsy Yu.N. The effect of temperature and strain rate on the interaction between an edge dislocation and an interstitial dislocation loop in α -iron // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2007. Vol. 19. № 45. Article number 456211. DOI: [10.1088/0953-8984/19/45/456211](https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/45/456211).

REFERENCES

- Golubeva A.V., Cherkez D.I. Hydrogen retention in doped tungsten materials developed for fusion (review). *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Termoyadernyy sintez*, 2018, vol. 41, no. 4, pp. 26–37. DOI: [10.21517/0202-3822-2018-41-4-26-37](https://doi.org/10.21517/0202-3822-2018-41-4-26-37).
- Khripunov B.I., Koydan V.S., Ryazanov A.I., Gurev V.M., Kornienko S.N., Latushkin S.T., Muksunov A.M., Semenov E.V., Stolyarova V.G., Unezhev V.N. Radiation-damaged tungsten: production and study under steady-state plasma flux. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Termoyadernyy sintez*, 2017, vol. 40, no. 4, pp. 40–49. DOI: [10.21517/0202-3822-2017-40-4-40-49](https://doi.org/10.21517/0202-3822-2017-40-4-40-49).
- Ipatova I., Harrison R.W., Donnelly S.E., Rushton M.J.D., Middleburgh S.C., Jimenez-Melero E. Void evolution in tungsten and tungsten-5wt.% tantalum under in-situ proton irradiation at 800 and 1000 °C. *Journal of Nuclear Materials*, 2019, vol. 526, article number 151730. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2019.07.030](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.07.030).
- Masters B.C. Dislocation loops in irradiated iron. *Philosophical Magazine*, 1965, vol. 11, no. 113, pp. 881–893. DOI: [10.1080/14786436508223952](https://doi.org/10.1080/14786436508223952).
- Muroga T., Watanabe H., Yoshida N. Correlation of fast neutron, fusion neutron and electron irradiations based on the dislocation loop density. *Journal of Nuclear Materials*, 1990, vol. 174, no. 2-3, pp. 282–288. DOI: [10.1016/0022-3115\(90\)90241-E](https://doi.org/10.1016/0022-3115(90)90241-E).
- Jumel S., Van Duysen J.-C., Ruste J., Domain C. Interactions between dislocations and irradiation-induced defects in light water reactor pressure vessel steels. *Journal of Nuclear Materials*, 2005, vol. 346, no. 2-3, pp. 79–97. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2005.04.065](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2005.04.065).
- Rong Z., Osetsy Yu.N., Bacon D.J. A model for the dynamics of loop drag by a gliding dislocation. *Philosophical Magazine*, 2005, vol. 85, no. 14, pp. 1473–1493. DOI: [10.1080/14786430500036371](https://doi.org/10.1080/14786430500036371).
- Osetsy Yu.N. Atomic-scale mechanisms of void strengthening in tungsten. *Tungsten*, 2021, vol. 3, no. 1, pp. 65–71. DOI: [10.1007/s42864-020-00070-6](https://doi.org/10.1007/s42864-020-00070-6).
- Gerold V. *Precipitation Hardening; Dislocations in Solids*. Amsterdam, North-Holland Publishing Company Publ., 1979. Vol. 4, 219 p.
- Shepelev I.A., Bayazitov A.M., Korznikova E.A. Modeling of supersonic crowdion clusters in FCC lattice: Effect of the interatomic potential. *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 2021, vol. 6, no. 1, article number 2050019. DOI: [10.1142/S2424913020500198](https://doi.org/10.1142/S2424913020500198).
- Kolesnikov I.D., Shepelev I.A. Excitation and propagation of 1-crowdion in bcc niobium lattice. *Materials. Technologies. Design*, 2022, vol. 4, no. 1, pp. 5–10. DOI: [10.54708/26587572_2022_4175](https://doi.org/10.54708/26587572_2022_4175).
- Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M.G. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices. *Computational Condensed Matter*, 2017, vol. 13, pp. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).

13. Yankovskaya U.I., Zakharov P.V. Heat resistance of a Pt crystal reinforced with CNT's. *Materials. Technologies. Design*, 2021, vol. 3, no. 4, pp. 64–67. DOI: [10.54708/26587572_2021_34664](https://doi.org/10.54708/26587572_2021_34664).
14. Chen H.-Y., Tsou N.-T. The Analysis of Thermal-Induced Phase Transformation and Microstructural Evolution in Ni-Ti Based Shape Memory Alloys By Molecular Dynamics. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 2019, vol. 120, no. 2, pp. 319–332. DOI: [10.32604/cmcs.2019.06447](https://doi.org/10.32604/cmcs.2019.06447).
15. Yoon T., Kang S., Kang T.Y., Kim T.-S. Detection of Graphene Cracks By Electromagnetic Induction, Insensitive to Doping Level. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 2019, vol. 120, no. 2, pp. 351–361. DOI: [10.32604/cmcs.2019.06672](https://doi.org/10.32604/cmcs.2019.06672).
16. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications. *Materials Science Reports*, 1993, vol. 9, no. 7-8, pp. 251–310. DOI: [10.1016/0920-2307\(93\)90001-U](https://doi.org/10.1016/0920-2307(93)90001-U).
17. Osetsky Yu.N., Bacon D.J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2003, vol. 11, no. 4, pp. 427–440. DOI: [10.1088/0965-0393/11/4/302](https://doi.org/10.1088/0965-0393/11/4/302).
18. Bonny G., Terentyev D., Elena J., Zinovev A., Minov B., Zhurkin E.E. Assessment of hardening due to dislocation loops in bcc iron: Overview and analysis of atomistic simulations for edge dislocations. *Journal of Nuclear Materials*, 2016, vol. 473, pp. 283–289. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2016.02.031](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.02.031).
19. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2004, vol. 69, no. 14, article number 144113. DOI: [10.1103/physrevb.69.144113](https://doi.org/10.1103/physrevb.69.144113).
20. Shepelev I.A., Dmitriev S.V., Kudreyko A.A., Velarde M.G., Korznikova E.A. Supersonic voidions in 2D Morse lattice. *Chaos, Solitons & Fractals*, 2020, vol. 140, article number 110217. DOI: [10.1016/j.chaos.2020.110217](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110217).
21. Shepelev I.A., Korznikova E.A., Bachurin D.V., Semenov A.S., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, 2020, vol. 384, no. 1, article number 126032. DOI: [10.1016/j.physleta.2019.126032](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.126032).
22. Babicheva R.I., Evazzade I., Korznikova E.A., Shepelev I.A., Zhou K., Dmitriev S.V. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact. *Computational Materials Science*, 2019, vol. 163, pp. 248–255. DOI: [10.1016/j.commatsci.2019.03.022](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.03.022).
23. Shepelev I.A., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Dmitriev S.V. Mechanism of remote vacancy emergence by a supersonic crowdion cluster in a 2D Morse lattice. *Chinese Journal of Physics*, 2021, vol. 70, pp. 355–362. DOI: [10.1016/j.cjph.2021.01.010](https://doi.org/10.1016/j.cjph.2021.01.010).
24. Moradi Marjaneh A.M., Saadatmand D., Evazzade I., Babicheva R., Soboleva E.G., Srikanth N., Zhou K., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Mass transfer in the Frenkel-Kontorova chain initiated by molecule impact. *Physical Review E*, 2018, vol. 98, no. 2, article number 023003. DOI: [10.1103/PhysRevE.98.023003](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.023003).
25. Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain. *Journal of Nonlinear Science*, 2021, vol. 31, no. 1, article number 12. DOI: [10.1007/s00332-020-09663-4](https://doi.org/10.1007/s00332-020-09663-4).
26. Korznikova E., Shunaev V.V., Shepelev I.A., Glukhova O.E., Dmitriev S.V. Ab initio study of the propagation of a supersonic 2-crowdion in fcc Al. *Computational Materials Science*, 2022, vol. 204, article number 111125. DOI: [10.1016/j.commatsci.2021.111125](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.111125).
27. Terentyev D., Malerba L., Bacon D.J., Osetsky Yu.N. The effect of temperature and strain rate on the interaction between an edge dislocation and an interstitial dislocation loop in α -iron. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2007, vol. 19, no. 45, article number 456211. DOI: [10.1088/0953-8984/19/45/456211](https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/45/456211).

Simulation of overcoming obstacles in the form of pores by dislocations in tungsten

© 2022

Arseny M. Kazakov^{*1,5}, student

Yuliya R. Sharapova¹, researcher

Rita I. Babicheva^{2,6}, PhD (Physics and Mathematics),

researcher of the School of Mechanical and Aerospace Engineering

Alexandr V. Zinovev^{3,7}, PhD (Physics and Mathematics), researcher

Dmitry A. Terentyev³, PhD (Physics and Mathematics), researcher

Alexandr S. Semenov^{4,8}, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

²Nanyang Technological University, Singapore (Singapore)

³SCK-CEN (Belgian Nuclear Research Centre), Mol (Belgium)

⁴Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Mirny (Russia)

*E-mail: arseny.m.kazakov@gmail.com

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8278-8705>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5388-3466>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1332-5125>

⁸ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

Received 27.04.2022

Accepted 14.07.2022

Abstract: Tungsten is widely used as a material capable of withstanding working conditions in nuclear reactors and other extreme conditions. Under the influence of irradiation, such defects as Frenkel pairs, pores, and dislocation loops are formed in the metal. Therefore, the research aimed at studying the interactions of these defects with each other and their influence on the mechanical properties of the metal are relevant. The paper presents the theoretical study based on the molecular dynamics method, the purpose of which is to investigate the mechanism of strain hardening of tungsten associated with the interaction of dislocations and pores. The authors solved this problem using the LAMMPS package, carried out the integration of atoms motion equations by the fourth order Verlet method. The model under the study is a single crystal of a certain [111], $[-1-12]$, $[1-10]$ orientation along the basic X, Y, and Z coordinate axis relatively, in which the slip of edge dislocations in the main slip system of BCC metals and their interaction with pores is considered. The authors studied the influence of a pore size on the shear stress magnitude: the growth of pore diameter is proportional to the stress growth. The dependences of shear stress on the shear strain in the temperature range of 600–1400 K are calculated, whereby the temperature change does not significantly influence the stress value. The study shows that dislocations cut the pores and, upon the repeated interaction with a pore, a lower value of peak shear stress is observed than during the first one. The presence of pores leads to the flow stress increase, and such an effect becomes more evident with the increasing pore diameter. The flow stress increases thrice for pores with a diameter of 6 nm compared to the material without pores. The authors described the mechanism of interaction between the edge dislocations and pores under the influence of shear stress.

Keywords: tungsten; molecular dynamics method; pores; dislocations; defects interaction; shear deformation.

Acknowledgments: The research was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the state assignment of FSBEI HE USATU (agreement No. 075-03-2022-318/1) “Youth Scientific Laboratory of REC “Metals and Alloys at Extreme Conditions” for A.V. Zinovyev (calculations), grant No. NSh-4320.2022.1.2 for A.M. Kazakov (analysis and discussion of obtained results), grant of the Russian Science Foundation No. 21-12-00275 for A.S. Semenov (task description, research conceptualization).

For citation: Kazakov A.M., Sharapova Yu.R., Babicheva R.I., Zinovev A.V., Terentyev D.A., Semenov A.S. Simulation of overcoming obstacles in the form of pores by dislocations in tungsten. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 76–84. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-76-84.

Конечно-элементное моделирование усталостного поведения медицинского имплантата, изготовленного из титана в крупнозернистом и наноструктурном состояниях

© 2022

*Капустин Алексей Владимирович**¹, аспирант кафедры материаловедения и физики металлов
Еникеев Нариман Айратович^{1,2,3}, доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник лаборатории «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях»,
профессор кафедры материаловедения и физики металлов

¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

²Бакинский государственный университет, Уфа (Россия)

*E-mail: kapustin129@yandex.ru

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7503-8949>

Поступила в редакцию 27.04.2022

Принята к публикации 02.08.2022

Аннотация: В настоящее время для повышения качества жизни широко используется дентальная имплантация, и обеспечение надежного функционирования и долговечности имплантируемых изделий представляет собой одну из важнейших задач современной стоматологии. Разработка новых биоматериалов с улучшенными свойствами, таких как наноструктурные материалы, расширяет возможности миниатюризации медицинских изделий для создания имплантатов нового поколения. При проектировании этих устройств большую роль играет компьютерное моделирование, позволяющее эффективно определять дизайн имплантата в зависимости от используемых материалов и условий эксплуатации. В настоящей работе представлены результаты моделирования методом конечных элементов для сравнительного анализа деформированного поведения имплантата в условиях циклической нагрузки. В качестве материала имплантата рассматривали крупнозернистый технически чистый титан и наноструктурный титан с улучшенными свойствами. Рассматривали различные компоновки имплантируемого устройства в соответствии с условиями проведения усталостных испытаний – с учетом и без учета влияния абатмента и реакции основания. Установлены характеристики имплантата, такие как усталостная долговечность и коэффициент запаса для конкретного типа компоновки и типа материала, а также распределение эквивалентных напряжений, в том числе с учетом знака. Показано, что наиболее реалистичные результаты достигаются при моделировании устройства в компоновке «абатмент – имплантат – база». Продемонстрировано, что прочностные характеристики, определяющие разрушение изделия, описываются максимальными главными напряжениями, а исследованная конфигурация имплантата обеспечивает его длительное надежное функционирование в случае изготовления исключительно из наноструктурного титана с повышенными свойствами.

Ключевые слова: дентальный имплантат; метод конечных элементов; наноструктурные материалы; титан; прочность; усталостные свойства.

Благодарности: Н.А. Еникеев признателен поддержке научно-исследовательской лаборатории Евразийского НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» ФГБОУ ВО «УГАТУ» в рамках государственного задания (соглашение № 075-03-2021-014/4) Министерства науки и высшего образования РФ.

Для цитирования: Капустин А.В., Еникеев Н.А. Конечно-элементное моделирование усталостного поведения медицинского имплантата, изготовленного из титана в крупнозернистом и наноструктурном состояниях // *Frontier Materials & Technologies*. 2022. № 3. С. 85–95. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-85-95.

ВВЕДЕНИЕ

Разработка имплантатов для дентального протезирования – актуальное направление современной стоматологии, представляющее большое значение для развития лечебно-реабилитационной сферы здравоохранения. Это направление получает дополнительные возможности для проектирования и создания передовых имплантатов нового поколения в результате разработки биоматериалов со значительно улучшенными механическими и функциональными свойствами, в частности за счет наноструктурирования. Как показано в недавнем обзоре [1], наноструктурирование, например деформационными методами, используется для измельчения зеренной структуры поликристаллических материалов и позволяет получать объемные образцы широкого спектра металлов и сплавов, демонстрирующих

существенно улучшенные прочностные и функциональные свойства, в том числе привлекательные для применения в биомедицине. Получаемые материалы характеризуются, как правило, значениями размеров зерен в диапазоне 100–1000 нм, что позволяет относить их к категории ультрамелкозернистых материалов. В то же время эти материалы могут обладать рядом особенностей, характерных для наноразмерного масштаба (двойники, выделения, сегрегации легирующих элементов, конфигурации дефектов и т. д.), которые могут существенно влиять на их свойства. Для отражения значимости этих эффектов используется термин «наноструктурные материалы» [1]. Наноструктурные материалы медицинского назначения, такие как биосовместимый технически чистый титан, могут демонстрировать значительно увеличенные (в 1,5–2 раза) прочностные характеристики как при статических, так и усталостных

испытаниях по сравнению с крупнозернистым состоянием материала [2]. Более того, наноструктурный титан характеризуется повышенной биосовместимостью, что было подтверждено сравнительными *in vivo* испытаниями технически чистого титана в ультрамелкозернистом состоянии с точки зрения образования воспалительных клеток (макрофагов) на поверхности имплантата в работе [3]. Авторы [4] показали, что ультрамелкозернистый титан обеспечивает также лучшую адгезию, пролиферацию и живучесть остеобластов по сравнению с материалом в крупнозернистом состоянии. Эти преимущества открыли возможность создания передовых миниатюризированных конструкций зубных имплантатов, крайне привлекательных с клинической точки зрения [2; 5].

В процессе эксплуатации дентальный имплантат и связанные с ним биологические ткани подвергаются разнообразным длительным нагрузкам, возникают риски повреждений и усталостного разрушения имплантата. Компьютерное моделирование позволяет эффективно прогнозировать надежное функционирование модернизированных имплантируемых устройств. В работе [6] приводится обзор результатов применения численных расчетов для стоматологии и челюстно-лицевой хирургии. Авторы указывают, что метод конечных элементов (МКЭ) является эффективным инструментом для разработки зубных и челюстных имплантатов. Результаты верификации численных расчетов МКЭ экспериментальными методами *in vitro* [7] доказывают высокую надежность конечно-элементных численных расчетов механического поведения биоматериалов. Авторы [8] применили МКЭ для анализа биомеханического поведения конструкции имплантатов, варьируя тип соединения, длину и диаметр устройства, что позволило найти конфигурацию параметров, обеспечивающую оптимальное распределение напряжений.

Моделирование МКЭ зарекомендовало себя также и при разработке изделий, изготовленных из материалов с модифицированными свойствами, в первую очередь из наиболее биосовместимого металла – титана. В работе [5] приведены данные, свидетельствующие, что МКЭ может успешно учитывать повышенные свойства ультрамелкозернистого титана Grade 4, полученного интенсивной пластической деформацией, а в работе [9] применение МКЭ позволило численно рассчитать конструкции, изготовленные из пористого материала, синтезированного аддитивными технологиями.

Несмотря на то, что моделирование МКЭ уже длительное время успешно применяется для проектирования имплантируемых систем, работы, посвященные исследованию влияния наноструктурного состояния материала на поведение имплантата под воздействием эксплуатационных нагрузок, мало представлены в литературе. Кроме того, открытым остается вопрос о деформационном поведении имплантата в различных режимах функциональной нагрузки: поскольку при эксплуатации возможно неравномерное распределение нагрузки на верхнюю часть дентального имплантата, важно учитывать эффект ее локализации на длительность надежного функционирования имплантата. Дополнительное значение имеет вид компоновки моделируемой конструкции [10], поскольку имплантат является частью сборной системы, включающей в себя осно-

вание, сам имплантат и абатмент, имитирующий верхнюю часть зуба пациента и представляющий собой связующее звено между имплантатом, заменяющим корень зуба, и коронкой.

Цель работы – оценка влияния локализации нагрузки и схемы компоновки на результаты усталостных испытаний полноценной модели зубного имплантата, изготовленного из титана в крупнозернистом и наноструктурном состоянии с помощью конечно-элементного моделирования.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для прочностных исследований при различных нагрузках конструкций дентального имплантата в настоящее время принят международный стандарт ISO 14801-2007 или его российский аналог ГОСТ Р ИСО 14801-2012, согласно которому были выбраны параметры моделирования.

Вначале был произведен статический расчет имплантата под действием сил F . Затем был задан ряд $T(t)$, описывающий изменение системы сил F со временем. Изменение системы внешних сил со временем определили по формуле

$$F(t) = k_{sc}FT(t),$$

где k_{sc} – множитель, уточняющий значения F по интервалу меняющейся нагрузки.

В силу линейности системы компоненты тензора напряжения в точке (x, y, z) были рассчитаны как

$$\sigma_{ij}(t) = \sigma_{ij}^{FE} k_{sc}FT(t),$$

где $i, j = \overline{x, y, z}$, σ_{ij}^{FE} – значение компонент тензора напряжения из статического решения.

Историю нагружения определили через $T(t)$ и его дальнейшее преобразование.

Параметры истории многоосного нагружения привели к эквивалентным характеристикам, получаемым в условиях одноосного нагружения, путем применения соотношения, базирующегося на критериях прочности в статике.

Для анализа усталостного поведения имплантата в среде ANSYS были рассчитаны значения максимального главного напряжения и напряжения по фон Мизесу, которые используются в литературе для оценки вероятности разрушения и распределения напряжений в деталях [11].

Максимальное главное напряжение (Max Principal, M/P):

$$\sigma_a^{np} = \begin{cases} \sigma_{1a}, & |\sigma_{1a}| \geq |\sigma_{3a}| \\ \sigma_{3a}, & |\sigma_{1a}| < |\sigma_{3a}| \end{cases}, \quad \sigma_m^{np} = \begin{cases} \sigma_{1m}, & |\sigma_{1m}| \geq |\sigma_{3m}| \\ \sigma_{3m}, & |\sigma_{1m}| < |\sigma_{3m}| \end{cases},$$

где σ_{1a} , σ_{2a} , σ_{3a} , и σ_{1m} , σ_{2m} , σ_{3m} – главные напряжения тензоров амплитудных и средних значений напряжений соответственно.

Equivalent von-Mises (E/M), или напряжение по фон Мизесу – эквивалентное напряжение, выраженное как сумма всех главных напряжений, действующих на механическую конструкцию во всех направлениях:

$$\begin{cases} \sigma_a^{np} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{1a} - \sigma_{2a})^2 + (\sigma_{2a} - \sigma_{3a})^2 + (\sigma_{3a} - \sigma_{1a})^2} \\ \sigma_m^{np} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{1m} - \sigma_{2m})^2 + (\sigma_{2m} - \sigma_{3m})^2 + (\sigma_{3m} - \sigma_{1m})^2} \end{cases}$$

Signed von-Mises (S/M), или напряжение по фон Мизесу со знаком:

$$\begin{cases} \sigma_a^{np} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{1a} - \sigma_{2a})^2 + (\sigma_{2a} - \sigma_{3a})^2 + (\sigma_{3a} - \sigma_{1a})^2} * \text{sigm}(\sigma_{1a}) \\ \sigma_m^{np} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{1m} - \sigma_{2m})^2 + (\sigma_{2m} - \sigma_{3m})^2 + (\sigma_{3m} - \sigma_{1m})^2} * \text{sigm}(\sigma_{1m}) \end{cases}$$

$$\text{где } \text{sigm}(x) = \begin{cases} 1, x > 0 \\ -1, x < 0 \end{cases}$$

Эта величина аналогична напряжению по фон Мизесу и отличается тем, что напряжение по фон Мизесу всегда показывает положительное значение, а формулировка S/M учитывает, что напряжение по фон Мизесу принимает знак наибольшего абсолютного основного напряжения. По этому параметру можно определить, испытывает объект растяжение или сжатие.

В большинстве случаев соотношения получены при симметричном цикле нагружения и, как следствие, не учитывают наличие средних напряжений, которые существенно влияют на сопротивление усталости. Полученные характеристики были сведены к эквивалентным по повреждаемости в условиях симметричного цикла нагружения. Для выполнения данного перехода использовали соотношения для амплитуды эквивалентного симметричного цикла напряжений $\sigma_{a \text{ экв}}$ на основании соотношения Гудмана, которое применяется для малопластичных материалов [12; 13]:

$$\sigma_{a \text{ экв}} = \begin{cases} \frac{\sigma_a^{np}}{\sigma_b}, \sigma_a^{np} \geq 0 \\ 1 - \frac{\sigma_m^{np}}{\sigma_b}, \sigma_a^{np} < 0 \end{cases}$$

где σ_b – предел прочности материала;
 σ_m – предел текучести материала.

Был рассчитан ряд определяющих характеристик сопротивления усталости, широко применяющихся при конечно-элементном анализе на платформе ANSYS [12; 13].

Усталостная долговечность (*Life*) N – это характеристика выносливости металлов при напряжениях выше предела выносливости, определяемая числом циклов напряжения (деформации) до образования трещины заданной протяженности N .

Коэффициент запаса по долговечности (*Damage*) определяется по формуле

$$n_{SF}^N = \frac{N_6}{N}$$

где N – текущая долговечность;

N_6 – расчетная долговечность, по умолчанию $N_6 = 10^8$.

Данный коэффициент определяется как расчетный срок службы, деленный на имеющийся срок службы. Значение *Damage* больше 1 указывает на то, что деталь выйдет из строя из-за усталостных эффектов до того, как будет достигнут расчетный срок службы. Таким образом, для дентального имплантата при заданном расчетном сроке службы данный параметр должен быть меньше 1.

Коэффициент запаса по амплитудам напряжений (*Safety Factor, S/F*), определяемый по формуле

$$n_{SF}^{\sigma} = \frac{\sigma_{1a}}{\sigma_{a \text{ экв}}}$$

представляет собой контурную диаграмму коэффициента безопасности по отношению к усталостному разрушению при заданном расчетном сроке службы и показывает отношение избыточного запаса прочности. При расчете данный параметр не должен падать ниже 1, иначе деталь при расчетном сроке службы рискует выйти из строя. Конструкция с $S/F=1$ будет поддерживать только расчетную нагрузку, и любая дополнительная нагрузка приведет к разрушению конструкции.

Эквивалентная амплитуда напряжений (*Equivalent Alternating Stress, E/A/S, $\sigma_{a \text{ экв}}$*) представляет собой результат сведения приведенных выше характеристик одноосного цикла нагружения к эквивалентным по повреждаемости характеристикам симметричного цикла. Эта величина не должна превышать предела прочности или предела текучести материала, используемого в изготовлении дентального имплантата.

Объектом исследования был выбрана конструкция, соответствующая дизайну имплантата *Timplant s.r.o.* с диаметром 2,4 мм, разработанного для изготовления из нанотитана, полученного методами интенсивной пластической деформации, и показавшего высокую клиническую эффективность [2], что позволяет рассматривать его как основу для проектирования усовершенствованных имплантатов, изготовленных из наноструктурных биоматериалов [14]. Технический чертеж имплантата представлен на рис. 1.

Моделирование МКЭ выполняли на платформе ANSYS, материалы при расчетах рассматривались как изотропные и гомогенные в рамках линейного и упругого поведения.

Характеристики материала имплантата, используемые для численных расчетов в крупнозернистом и наноструктурном состояниях, приведены в таблице 1 и на рис. 2 согласно литературным данным [2]. Отличие усталостного поведения материала в разных состояниях учитывали аналогично [15]. Абатмент был выполнен из конструкционной стали в соответствии с [16], так же как и база.

Были рассмотрены несколько вариантов различных конструктивных схем с целью оценки влияния параметров нагрузки на усталостные характеристики имплантата. За основу взяли конструктивную компоновку «абатмент – имплантат – база», выполненную по ГОСТ Р ИСО 14801-2012 (рис. 3). Для расчетов были выбраны конструктивные компоновки вида «абатмент – имплантат»,

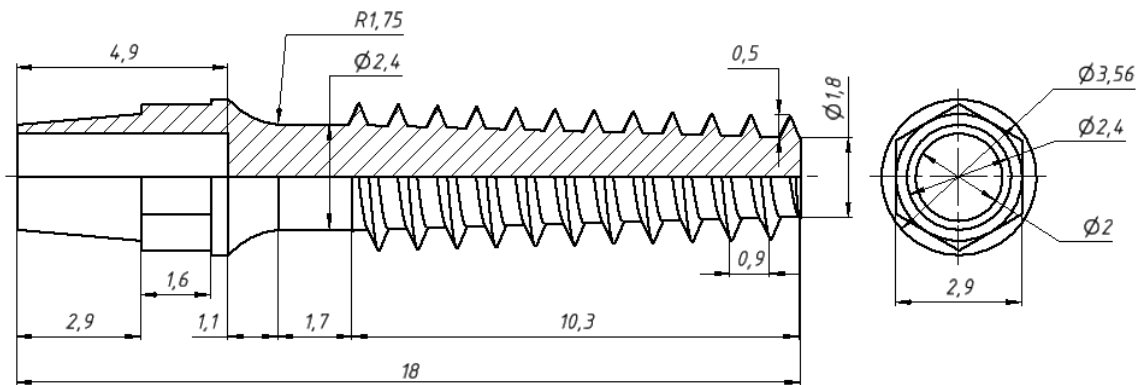


Рис. 1. Технический чертёж дентального имплантата
 Fig. 1. Design drawing of a dental implant

Таблица 1. Свойства материалов имплантата, использованные в расчетах
 Table 1. Properties of implant materials used in calculations

Параметр	Крупнозернистый титан	Наноструктурный титан
Модуль Юнга, ГПа	110	110
Коэффициент Пуассона	0,32	0,32
Предел прочности, МПа	730	1255
Предел текучести, МПа	500	1200

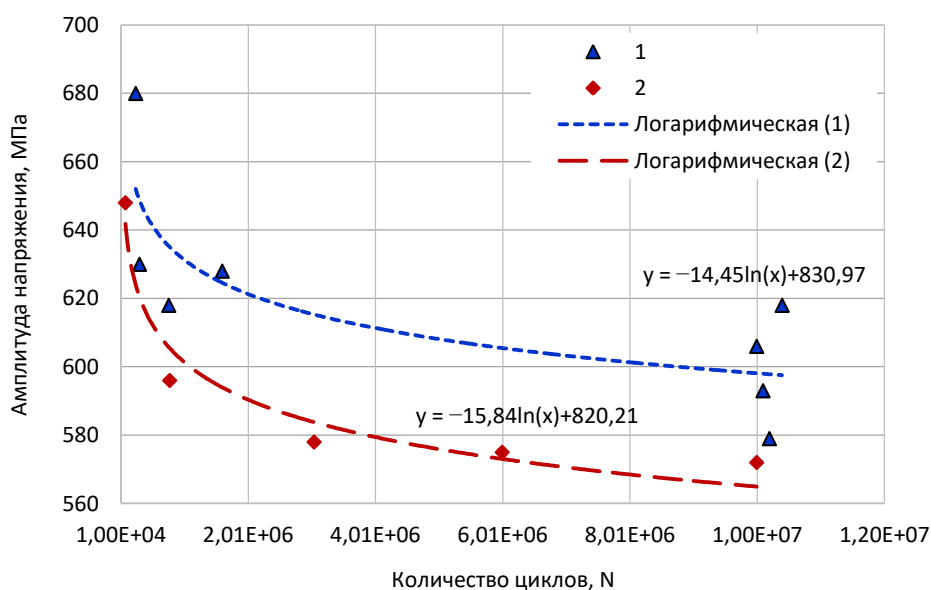


Рис. 2. Усталостные кривые для наноструктурного (1) и крупнозернистого (2) титана
 Fig. 2. Fatigue curves for nanostructured (1) and coarse-grained (2) titanium

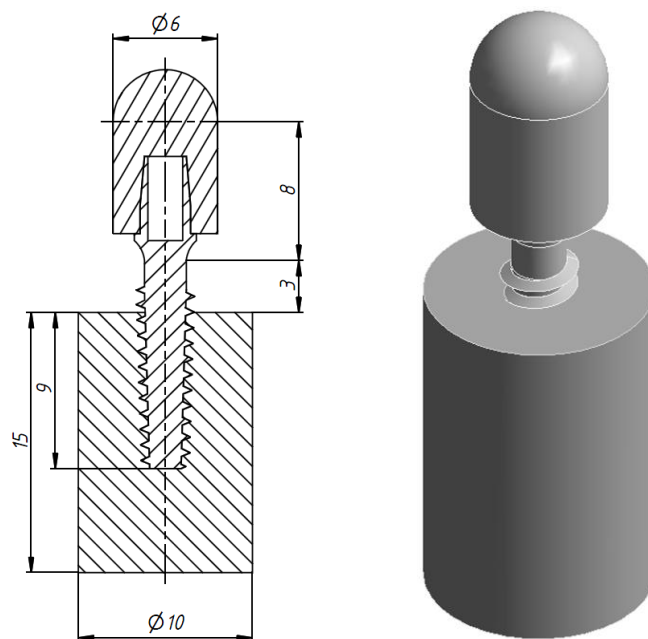


Рис. 3. Схема конструктивной сборки: «абатмент – имплантат – база»
 Fig. 3. Constructional assembling scheme: "abutment – implant – base"

«имплантат – база», «имплантат», чтобы установить возможные пути упрощения процедуры моделирования для оптимизации счетного времени. Испытания проводили с учетом того, что площадь контакта имплантата во всех схемах одинакова (рис. 4).

Испытание имплантата осуществлялось путем равномерной нагрузки на полусферу абатмента с вектором нагрузки под углом 30° к оси имплантата согласно ГОСТ Р ИСО 14801-2012.

Рассматривали несколько вариантов локализации нагрузки без абатмента (рис. 5) для схем «имплантат – база» и «имплантат». Выбор вариантов обусловлен особенностями функционирования конструкции дентального имплантата (рис. 4). Вариант 1 предполагает контактную нагрузку через абатмент, при этом она сосредоточена на одном из краев имплантата (при откусывании). При варианте 2 нагрузка распределена в объеме контактной площади абатмент – имплантат (при жевании). Вариант 3 подразумевает, что абатмент передает вертикальную контактную нагрузку, распределенную по верхней оконечности имплантата (при ударном воздействии).

Сетка моделирования была представлена треугольными элементами с размерами ячеек 0,1 мм. Усталостное испытание имплантата осуществлялось путем нагружения верхней части с переменной локализацией нагрузки с использованием модуля «Анализ усталости», количество циклов составило 2 075 000, значение периодической силы равнялось 75,6 Н. Распределение вектора нагрузки, приведенное к осям системы координат, связанной с имплантатом, составило $-37,8$ Н (по оси x) и $-65,5$ Н (по оси y).

В рамках представленного выше подхода рассчитали следующие параметры:

1) максимальное главное напряжение (Max Principal, M/P);

2) напряжение по фон Мизесу (Equivalent von-Mises, E/M);

3) напряжение по фон Мизесу со знаком (Signed von-Mises, S/M).

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Результаты моделирования представлены в таблице 2 и на рис. 6. Таблица 2 суммирует все значения рассчитанных величин для рассмотренных вариантов компоновки и локализации нагрузки с учетом структурного состояния материала. Подразумевалось, что разрушение материала может происходить при достижении расчетных величин критических значений, при этом «Разрушение 1» означает, что критической величины (предела прочности материала) достигнуто эквивалентное напряжение; «Разрушение 2» означает, что $Damage > 1$; «Разрушение 3» – $Life = 0$. Видно, что компоновки, не учитывающие реакцию основания, дают нереалистичную оценку прогнозируемой функциональности имплантата в условиях циклической нагрузки по сравнению с базовой конфигурацией «абатмент – имплантат – база». Как следствие, в дальнейшем имеет смысл рассматривать только компоновки типа «абатмент – имплантат – база» или «имплантат – база».

Значения коэффициента запаса для имплантата, изготовленного из крупнозернистого и наноструктурного титана, представлены на рис. 6. Рассчитанные значения свидетельствуют о том, что компоновка без учета абатмента дает завышенные значения запаса прочности рассчитываемой конструкции. В отличие от компоновки «абатмент – имплантат – база», она предсказывает надежное функционирование изделия, выполненного из титана в крупнозернистом состоянии.

На рис. 7 представлены распределения напряжений в изделии из наноструктурного и крупнозернистого

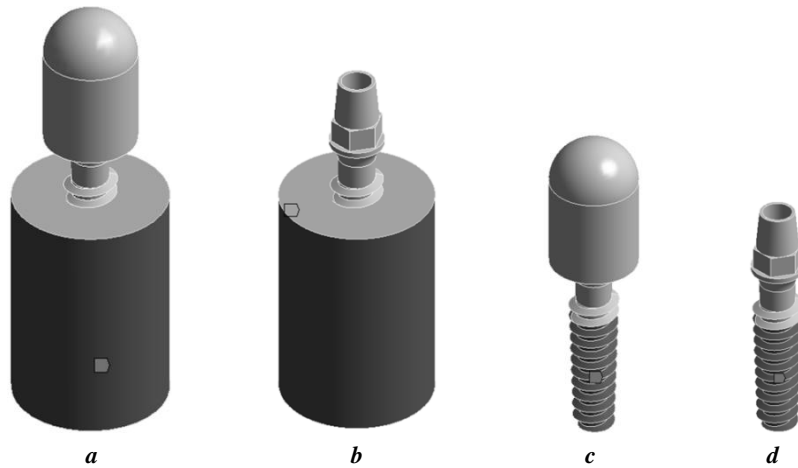


Рис. 4. Схема контакта крепления основания и рассмотренные конструктивные компоновки: **a** – «абатмент – имплантат – база»; **b** – «имплантат – база»; **c** – «абатмент – имплантат»; **d** – «имплантат»
Fig. 4. A scheme of a base fixation contact and considered structural arrangements: **a** – “abutment – implant – base”; **b** – “implant – base”; **c** – “abutment – implant”; **d** – “implant”

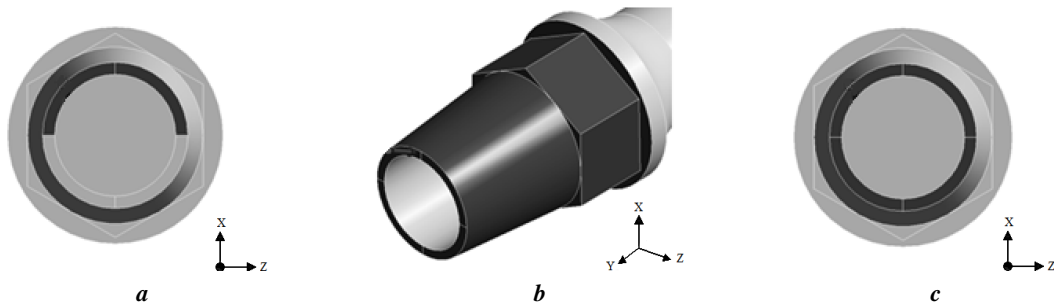


Рис. 5. Различная локализация нагрузки на верхнюю часть имплантата (выделено темным цветом): **a** – вариант 1 – краевая нагрузка; **b** – вариант 2 – нагрузка по всей контактной площади; **c** – вариант 3 – вертикальная нагрузка
Fig. 5. Various localizations of a load on the implant upper part (highlighted by the dark colour): **a** – variant 1 – edge load; **b** – variant 2 – the load over the entire contact area; **c** – variant 3 – vertical load

титана, рассчитанные для промоделированных компоновок типа «абатмент – имплантат – база». Из рис. 7 видно, что максимальные значения главных напряжений концентрируются в зоне, соответствующей шейке имплантата, а уровень максимальных значений выше для крупнозернистого титана (757 МПа), чем для наноструктурного (528 МПа).

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Анализ полученных результатов показывает, что при различной компоновке и локализации нагрузок моделируемый имплантат демонстрирует различное поведение. Как следует из сделанных наблюдений, конструкции, не учитывающие реакцию основания, существенно занижают способность изделия противостоять заданной циклической нагрузке вне зависимости от наличия абатмента. С другой стороны, конструкция типа «имплантат – база» дает завышенные значения для показателей коэффициента запаса при любом варианте локализации нагрузки. При этом максимальные значения напряжений достигаются при локализации приложенной нагрузки по всей контактной площади верхней

части имплантата. Это обстоятельство можно учитывать при выборе схемы моделирования усталостных процессов в данной компоновке. Результаты моделирования компоновки «абатмент – имплантат – база» (таблица 2) дают наиболее реалистичное предсказание усталостного поведения протезируемого устройства в зависимости от используемого для его изготовления материала. В литературе встречаются работы, для упрощения расчетных процедур не учитывающие эффекты, связанные с наличием абатмента в формировании напряженно-деформированного состояния. Настоящее исследование демонстрирует, что для обеспечения корректного проектирования медицинских имплантатов роль абатмента необходимо принимать во внимание.

Известно, что численные оценки усталостного поведения при помощи МКЭ показывают хорошее соответствие опытным данным [17]. В то же время свойства материала, используемого для изготовления имплантата, могут заметно повлиять на параметры его функционирования под циклическими нагрузками [5; 18]. Использование наноструктурного титана в качестве материала для имплантата позволяет обеспечить его надежное функционирование при заданной циклической

Таблица 2. Результаты моделирования МКЭ для различных вариантов компоновки устройства, локализации нагрузки и состояния материала
 Table 2. The results of FEM simulation for various device arrangement options, load localization and material's state

Компоновка	№	Тип	E/A/S	Damage	Life, циклы	E/A/S	Damage	Life, циклы
			МПа			МПа		
			Max	Max	Min	Max	Max	Min
			Наноструктурный титан			Крупнозернистый титан		
Абатмент – имплантат – база	1	E/M	418	9,6·10 ⁻⁸	2,2·10 ¹³	550	1·10 ⁻⁷	2,075·10 ¹³
	2	M/P	528			Разрушение 1		
	3	S/M	343			427	1·10 ⁻⁷	2,075·10 ¹³
Абатмент – имплантат	4	–	Разрушение 1, 2, 3					
Имплантат (1 вариант)	7	E/M	Разрушение 2, 3			Разрушение 1, 2, 3		
	8	M/P	Разрушение 1, 2, 3					
	9	S/M	Разрушение 2, 3					
Имплантат (2 вариант)	10	E/M	Разрушение 3					
	11	M/P	Разрушение 2, 3					
	12	S/M	Разрушение 3					
Имплантат (3 вариант)	13	E/M	Разрушение 2, 3					
	14	M/P	Разрушение 1, 2, 3					
	15	S/M	Разрушение 2, 3					
Имплантат (1 вариант) – база	16	E/M	248	9,6·10 ⁻⁸	2,2·10 ¹³	289	1·10 ⁻⁷	2,075·10 ¹³
	17	M/P	288			346		
	18	S/M	207			212		
Имплантат (2 вариант) – база	19	E/M	171			171		
	20	M/P	234			234		
	21	S/M	171			171		
Имплантат (3 вариант) – база	22	E/M	290			350		
	23	M/P	350			438		
	24	S/M	236			261		

нагрузке – максимальная эквивалентная амплитуда напряжений $E/A/S$ не достигает критического уровня предела текучести σ_T материала: $\sigma_{\text{ЭКВИВ}}$ (528 МПа) < σ_T (1200 МПа). При использовании крупнозернистого титана имплантат либо разрушается, либо $\sigma_{\text{ЭКВИВ}}$ (550 МПа) достигает значений, заметно превышающих σ_T материала (500 МПа), что может привести к его деформации. Наибольшие оценки внутренних напряжений позволяет сделать величина максимального главного напряжения M/P .

Коэффициент запаса по амплитудам напряжений для наноструктурного имплантата демонстрирует показатели не меньше порогового значения ($S/F > 1,2$), для

крупнозернистого титана наблюдается обратная картина – $S/F \approx 0,9$, что согласуется с данными по максимальным значениям напряжений из таблицы 2. В связи с этим выбранный дизайн миниатюризованного имплантата позволяет использовать для его изготовления материал только в наноструктурном состоянии. Это утверждение подтверждается сопоставлением с экспериментальными данными, которые свидетельствуют о том, что наноструктурный титан обеспечивает надежное функционирование имплантата с таким дизайном (диаметр – 2,4 мм) [2], в отличие от крупнозернистого материала.

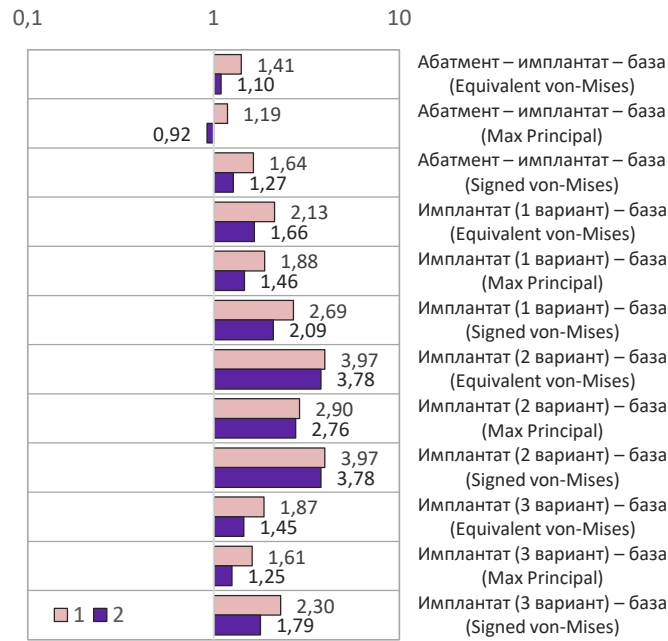


Рис. 6. Значения коэффициента запаса по амплитудам напряжений для компоновок имплантата, учитывающих реакцию основания:
 1 – наноструктурный титан; 2 – крупнозернистый титан
Fig. 6. Safety factor values according to the stress amplitudes for implant arrangements considering base reaction:
 1 – nanostructured titanium; 2 – coarse-grained titanium

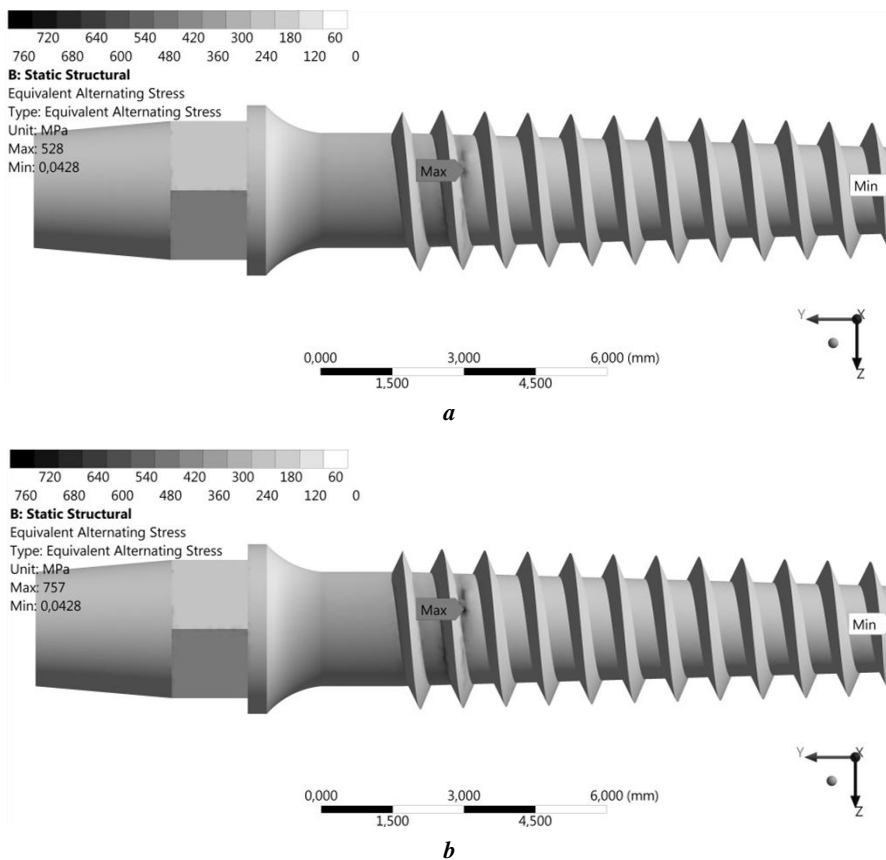


Рис. 7. Вид напряженного состояния имплантата для компоновки «абатмент – имплантат – база», изготовленного из титана в наноструктурном (а) и крупнозернистом (б) состоянии
Fig. 7. A view of the implant stress state for the “abutment – implant – base” arrangement produced from titanium in nanostructured (a) and coarse-grained (b) states

Есть основания полагать, что корректный учет типа материала основания позволит еще более прецизионно моделировать процессы, связанные с усталостной прочностью имплантируемых устройств, изготовленных из материала с улучшенными свойствами. Как показано в [19] с применением комбинации моделирования МКЭ и поликристаллической пластичности, реализованной методом реалистичных элементов объема, а также в [20] в рамках многомасштабного моделирования, учет кристаллографической текстуры может быть критичен, особенно для материалов с более низкой кристаллической симметрией, чем кубическая – таких как титан с гексагональной плотноупакованной решеткой. Для развития данной темы запланирован ряд работ по моделированию влияния кристаллографической текстуры и анизотропии механических свойств на усталостное поведение изделий, выполненных из поликристаллических материалов, полученных деформационными методами.

ВЫВОДЫ

По результатам конечно-элементного моделирования дентального имплантата в различной компоновке, изготовленного из биосовместимого титана в крупнозернистом и наноструктурном состоянии, можно сделать следующие выводы.

1. Вариации компоновки и локализации нагрузок на имплантат оказывают значимое влияние на поведение имплантируемого устройства в условиях циклической нагрузки. Варианты компоновки, не учитывающие реакцию опоры, дают нереалистично заниженную жизнеспособность имплантата, независимо от материала изготовления. Вариант, не учитывающий наличие абатмента, завышает показатели надежности функционирования имплантата в условиях заданной схемы нагружения. Наиболее корректные результаты обеспечиваются моделированием схемы «абатмент – имплантат – база».

2. Максимальная концентрация напряжений локализуется у шейки имплантата, при этом надежное функционирование имплантата, выбранного для исследования дизайна, обеспечивается только при использовании наноструктурного титана в качестве материала исследования. При использовании крупнозернистого титана максимальное главное напряжение и напряжение по фон Мизесу превышают предел прочности и предел текучести материала соответственно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Ya., Blank V.D., Botta W.J., Bryla K., Cizek J., Divinski S., Enikeev N.A., Estrin Yu., Faraji G., Figueire-do R.B., Fuji M., Furuta T., Grosdidier T., Gubicza J., Hohenwarter A., Horita Z., Huot J., Ikoma Y., Janecek M., Kawasaki M., Kral P., Kuramoto S., Langdon T.G., Leiva D.R., Levitas V.I., Mazilkin A., Mito M., Miyamoto H., Nishizaki T., Pippan R., Popov V.V., Popova E.N., Purcek G., Renk O., Revesz A., Sauvage X., Sklenicka V., Skrotzki W., Straumal B.B., Suwas S., Toth L.S., Tsuji N., Valiev R.Z., Wilde G., Zehetbauer M.J., Zhu X. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances // *Materials Research Letters*. 2022. Vol. 10. № 4. P. 163–256. DOI: [10.1080/21663831.2022.2029779](https://doi.org/10.1080/21663831.2022.2029779).
- Polyakov A.V., Dluhoš L., Dyakonov G.S., Raab G.I., Valiev R.Z. Recent Advances in Processing and Application of Nanostructured Titanium for Dental Implants // *Advanced Engineering Materials*. 2015. Vol. 17. № 12. P. 1869–1875. DOI: [10.1002/adem.201500212](https://doi.org/10.1002/adem.201500212).
- Bindu S., Sanosh K., Smetana K., Balakrishnan A., Kim T.N. An in vivo evaluation of ultra-fine grained titanium implants // *Journal of Materials Science and Technology*. 2009. Vol. 25. № 4. P. 556–560.
- An B., Li Z., Diao X., Xin H., Zhang Q., Jia X., Wu Y., Li K., Guo Y. In vitro and in vivo studies of ultrafine-grain Ti as dental implant material processed by ECAP // *Materials Science and Engineering C*. 2016. Vol. 67. P. 34–41. DOI: [10.1016/j.msec.2016.04.105](https://doi.org/10.1016/j.msec.2016.04.105).
- Valiev R.Z., Prokofiev E.A., Kazarinov N.A., Raab G.I., Minasov T.B., Stráský J. Developing Nanostructured Ti Alloys for Innovative Implantable Medical Devices // *Materials*. 2020. Vol. 13. № 4. P. 967–981. DOI: [10.3390/ma13040967](https://doi.org/10.3390/ma13040967).
- Van Staden R.C., Guan H., Loo Y.C. Application of the finite element method in dental implant research // *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*. 2006. Vol. 9. № 4. P. 257–270. DOI: [10.1080/10255840600837074](https://doi.org/10.1080/10255840600837074).
- Rezende C.E.E., Chase-Diaz M., Costa M.D., Albaracin M.L., Paschoeto G., Sousa E.A.C., Rubo J.H., Borges A.F.S. Stress distribution in single dental implant system: three-dimensional finite element analysis based on an in vitro experimental model // *Journal of Craniofacial Surgery*. 2015. Vol. 26. № 7. P. 2196–2200. DOI: [10.1097/SCS.0000000000001977](https://doi.org/10.1097/SCS.0000000000001977).
- Borie E., Orsi I.A., Noritomi P.Y., Kemmoku D.T. Three-dimensional finite element analysis of the biomechanical behaviors of implants with different connections, lengths, and diameters placed in the maxillary anterior region // *International Journal of Oral and Maxillofacial Implants*. 2016. Vol. 31. № 1. P. 101–110. DOI: [10.11607/jomi.4120](https://doi.org/10.11607/jomi.4120).
- Huang C.-C., Li M.-J., Tsai P.-I., Kung P.-C., Chen S.-Y., Sun J.-S., Tsou N.-T. Novel design of additive manufactured hollow porous implants // *Dental Materials*. 2020. Vol. 36. № 11. P. 1437–1451. DOI: [10.1016/j.dental.2020.08.011](https://doi.org/10.1016/j.dental.2020.08.011).
- Akça K., Çehreli M.C., Iplikçioğlu H. Evaluation of the mechanical characteristics of the implant-abutment complex of a reduced-diameter morse-taper implant: A nonlinear finite element stress analysis // *Clinical Oral Implants Research*. 2003. Vol. 14. № 4. P. 444–454. DOI: [10.1034/j.1600-0501.2003.00828.x](https://doi.org/10.1034/j.1600-0501.2003.00828.x).
- Kul E., Korkmaz I.H. Effect of different design of abutment and implant on stress distribution in 2 implants and peripheral bone: A finite element analysis study // *Journal of Prosthetic Dentistry*. 2021. Vol. 126. № 5. P. 664.e1–664.e9. DOI: [10.1016/j.prosdent.2020.09.058](https://doi.org/10.1016/j.prosdent.2020.09.058).
- Darwich A., Alammari A., Heshmeh O., Szabolcs S., Nazha H. Fatigue loading effect in custom-made all-on-4 implants system: A 3D finite elements analysis // *IRBM*. 2021. DOI: [10.1016/j.irbm.2021.06.008](https://doi.org/10.1016/j.irbm.2021.06.008).
- Kayabaşı O., Yüzbasoğlu E., Erzincanlı F. Static, dynamic and fatigue behaviors of dental implant using

- finite element method // *Advances in Engineering Software*. 2006. Vol. 37. № 10. P. 649–658. DOI: [10.1016/j.advensoft.2006.02.004](https://doi.org/10.1016/j.advensoft.2006.02.004).
14. Valiev R.Z., Parfenov E.V., Parfenova L.V. Developing nanostructured metals for manufacturing of medical implants with improved design and biofunctionality // *Materials Transactions*. 2019. Vol. 60. № 7. P. 1356–1366. DOI: [10.2320/matertrans.MF201943](https://doi.org/10.2320/matertrans.MF201943).
 15. Fintová S., Dlhý P., Mertová K., Chlup Z., Duchek M., Procházková R., Hutař P. Fatigue properties of UFG Ti grade 2 dental implant vs. conventionally tested smooth specimens // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. 2021. Vol. 123. Article number 104715. DOI: [10.1016/j.jmbbm.2021.104715](https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2021.104715).
 16. Ayllón J.M., Navarro C., Vázquez J., Domínguez J. Fatigue life estimation in dental implants // *Engineering Fracture Mechanics*. 2014. Vol. 123. P. 34–43. DOI: [10.1016/j.engfracmech.2014.03.011](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2014.03.011).
 17. Duan Y., Gonzalez J.A., Kulkarni P.A., Nagy W.W., Griggs J.A. Fatigue lifetime prediction of a reduced-diameter dental implant system: Numerical and experimental study // *Dental Materials*. 2018. Vol. 34. № 9. P. 1299–1309. DOI: [10.1016/j.dental.2018.06.002](https://doi.org/10.1016/j.dental.2018.06.002).
 18. Çalloğlu Ş., Acar P. Design of β -Titanium microstructures for implant materials // *Materials Science and Engineering C*. 2020. Vol. 110. Article number 110715. DOI: [10.1016/j.msec.2020.110715](https://doi.org/10.1016/j.msec.2020.110715).
 19. Segurado J., Llorca J. Simulation of the deformation of polycrystalline nanostructured Ti by computational homogenization // *Computation Materials Science*. 2013. Vol. 76. P. 3–11. DOI: [10.1016/j.commatsci.2013.03.008](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.03.008).
 20. Mishnaevsky L., Levashov E., Valiev R.Z., Segurado J., Sabirov I., Enikееv N., Prokoshkin S., Solov'yov A.V., Korotitskiy A., Gutmanas E., Gotman I., Rabkin E., Psakj'E S., Dluhos L., Seefeldt M., Smolin A. Nanostructured titanium-based materials for medical implants: Modeling and development // *Materials Science and Engineering R: Reports*. 2014. Vol. 81. № 1. P. 1–19. DOI: [10.1016/j.mser.2014.04.002](https://doi.org/10.1016/j.mser.2014.04.002).
- ## REFERENCES
1. Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Ya., Blank V.D., Botta W.J., Bryla K., Cizek J., Divinski S., Enikееv N.A., Estrin Yu., Faraji G., Figueire-do R.B., Fujii M., Furuta T., Grosdidier T., Gubicza J., Hohenwarter A., Horita Z., Huot J., Ikoma Y., Janeczek M., Kawasaki M., Kral P., Kuramoto S., Langdon T.G., Leiva D.R., Levitas V.I., Mazilkin A., Mito M., Miyamoto H., Nishizaki T., Pippan R., Popov V.V., Popova E.N., Purcek G., Renk O., Revesz A., Sauvage X., Sklenicka V., Skrotzki W., Straumal B.B., Suwas S., Toth L.S., Tsuji N., Valiev R.Z., Wilde G., Zehetbauer M.J., Zhu X. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances. *Materials Research Letters*, 2022, vol. 10, no. 4, pp. 163–256. DOI: [10.1080/21663831.2022.2029779](https://doi.org/10.1080/21663831.2022.2029779).
 2. Polyakov A.V., Dluhoš L., Dyakonov G.S., Raab G.I., Valiev R.Z. Recent Advances in Processing and Application of Nanostructured Titanium for Dental Implants. *Advanced Engineering Materials*, 2015, vol. 17, no. 12, pp. 1869–1875. DOI: [10.1002/adem.201500212](https://doi.org/10.1002/adem.201500212).
 3. Bindu S., Sanosh K., Smetana K., Balakrishnan A., Kim T.N. An in vivo evaluation of ultra-fine grained titanium implants. *Journal of Materials Science and Technology*, 2009, vol. 25, no. 4, pp. 556–560.
 4. An B., Li Z., Diao X., Xin H., Zhang Q., Jia X., Wu Y., Li K., Guo Y. In vitro and in vivo studies of ultrafine-grain Ti as dental implant material processed by ECAP. *Materials Science and Engineering C*, 2016, vol. 67, pp. 34–41. DOI: [10.1016/j.msec.2016.04.105](https://doi.org/10.1016/j.msec.2016.04.105).
 5. Valiev R.Z., Prokofiev E.A., Kazarinov N.A., Raab G.I., Minasov T.B., Stráský J. Developing Nanostructured Ti Alloys for Innovative Implantable Medical Devices. *Materials*, 2020, vol. 13, no. 4, pp. 967–981. DOI: [10.3390/ma13040967](https://doi.org/10.3390/ma13040967).
 6. Van Staden R.C., Guan H., Loo Y.C. Application of the finite element method in dental implant research. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 2006, vol. 9, no. 4, pp. 257–270. DOI: [10.1080/10255840600837074](https://doi.org/10.1080/10255840600837074).
 7. Rezende C.E.E., Chase-Diaz M., Costa M.D., Albaracin M.L., Paschoeto G., Sousa E.A.C., Rubo J.H., Borges A.F.S. Stress distribution in single dental implant system: three-dimensional finite element analysis based on an in vitro experimental model. *Journal of Craniofacial Surgery*, 2015, vol. 26, no. 7, pp. 2196–2200. DOI: [10.1097/SCS.0000000000001977](https://doi.org/10.1097/SCS.0000000000001977).
 8. Borie E., Orsi I.A., Noritomi P.Y., Kemmoku D.T. Three-dimensional finite element analysis of the biomechanical behaviors of implants with different connections, lengths, and diameters placed in the maxillary anterior region. *International Journal of Oral and Maxillofacial Implants*, 2016, vol. 31, no. 1, pp. 101–110. DOI: [10.11607/jomi.4120](https://doi.org/10.11607/jomi.4120).
 9. Huang C.-C., Li M.-J., Tsai P.-I., Kung P.-C., Chen S.-Y., Sun J.-S., Tsou N.-T. Novel design of additive manufactured hollow porous implants. *Dental Materials*, 2020, vol. 36, no. 11, pp. 1437–1451. DOI: [10.1016/j.dental.2020.08.011](https://doi.org/10.1016/j.dental.2020.08.011).
 10. Akça K., Çehreli M.C., Iplikçioğlu H. Evaluation of the mechanical characteristics of the implant-abutment complex of a reduced-diameter morse-taper implant: A nonlinear finite element stress analysis. *Clinical Oral Implants Research*, 2003, vol. 14, no. 4, pp. 444–454. DOI: [10.1034/j.1600-0501.2003.00828.x](https://doi.org/10.1034/j.1600-0501.2003.00828.x).
 11. Kul E., Korkmaz I.H. Effect of different design of abutment and implant on stress distribution in 2 implants and peripheral bone: A finite element analysis study. *Journal of Prosthetic Dentistry*, 2021, vol. 126, no. 5, pp. 664.e1–664.e9. DOI: [10.1016/j.prosdent.2020.09.058](https://doi.org/10.1016/j.prosdent.2020.09.058).
 12. Darwich A., Alammar A., Heshmeh O., Szabolcs S., Nazha H. Fatigue loading effect in custom-made all-on-4 implants system: A 3D finite elements analysis. *IRBM*, 2021. DOI: [10.1016/j.irbm.2021.06.008](https://doi.org/10.1016/j.irbm.2021.06.008).
 13. Kayabaşı O., Yüzbaşıoğlu E., Erzincanlı F. Static, dynamic and fatigue behaviors of dental implant using finite element method. *Advances in Engineering Software*, 2006, vol. 37, no. 10, pp. 649–658. DOI: [10.1016/j.advensoft.2006.02.004](https://doi.org/10.1016/j.advensoft.2006.02.004).
 14. Valiev R.Z., Parfenov E.V., Parfenova L.V. Developing nanostructured metals for manufacturing of medical implants with improved design and biofunctionality. *Materials Transactions*, 2019, vol. 60, no. 7, pp. 1356–1366. DOI: [10.2320/matertrans.MF201943](https://doi.org/10.2320/matertrans.MF201943).

15. Fintová S., Dlhý P., Mertová K., Chlup Z., Duchek M., Procházka R., Hutář P. Fatigue properties of UFG Ti grade 2 dental implant vs. conventionally tested smooth specimens. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2021, vol. 123, article number 104715. DOI: [10.1016/j.jmbbm.2021.104715](https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2021.104715).
16. Ayllón J.M., Navarro C., Vázquez J., Domínguez J. Fatigue life estimation in dental implants. *Engineering Fracture Mechanics*, 2014, vol. 123, pp. 34–43. DOI: [10.1016/j.engfracmech.2014.03.011](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2014.03.011).
17. Duan Y., Gonzalez J.A., Kulkarni P.A., Nagy W.W., Griggs J.A. Fatigue lifetime prediction of a reduced-diameter dental implant system: Numerical and experimental study. *Dental Materials*, 2018, vol. 34, no. 9, pp. 1299–1309. DOI: [10.1016/j.dental.2018.06.002](https://doi.org/10.1016/j.dental.2018.06.002).
18. Çallıoğlu Ş., Acar P. Design of β -Titanium microstructures for implant materials. *Materials Science and Engineering C*, 2020, vol. 110, article number 110715. DOI: [10.1016/j.msec.2020.110715](https://doi.org/10.1016/j.msec.2020.110715).
19. Segurado J., Llorca J. Simulation of the deformation of polycrystalline nanostructured Ti by computational homogenization. *Computation Materials Science*, 2013, vol. 76, pp. 3–11. DOI: [10.1016/j.commatsci.2013.03.008](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.03.008).
20. Mishnaevsky L., Levashov E., Valiev R.Z., Segurado J., Sabirov I., Enikeev N., Prokoshkin S., Solov'yov A.V., Korotitskiy A., Gutmanas E., Gotman I., Rabkin E., Psakj'E S., Dluhos L., Seefeldt M., Smolin A. Nanostructured titanium-based materials for medical implants: Modeling and development. *Materials Science and Engineering R: Reports*, 2014, vol. 81, no. 1, pp. 1–19. DOI: [10.1016/j.mser.2014.04.002](https://doi.org/10.1016/j.mser.2014.04.002).

Finite-element simulation of fatigue behavior of a medical implant produced from titanium in the large-grained and nanostructured states

© 2022

*Aleksey V. Kapustin**¹, postgraduate student of Chair of Materials Science and Physics of Metals
Nariman A. Enikeev^{1,2,3}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics),
 senior researcher of laboratory “Metals and Alloys under the Extreme Conditions”,
 professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)²Bashkir State University, Ufa (Russia)*E-mail: kapustin129@yandex.ru³ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7503-8949>

Received 27.04.2022

Accepted 02.08.2022

Abstract: Nowadays, to improve the quality of life, dental implantation is widely used, and ensuring proper functioning and durability of the implantable devices is one of the most crucial tasks for modern-day dentistry. The development of new biomaterials with improved properties, such as nanostructured materials, widens the possibilities of medical goods miniaturization to create new-generation implants. Computer simulation plays a large part when designing these devices, which allows effectively specifying an implant design depending on the materials used and operation conditions. This paper presents the results of modeling using the finite-element method for the comparative analysis of an implant's deformed behavior within the cyclic load conditions. The authors considered large-grained commercially pure titanium and nanostructured titanium with improved properties as implant material. The authors analyzed various arrangements of an implanted device according to the fatigue testing conditions – considering and not considering the influence of an abutment and the base reaction. The study identified the implant's characteristics, such as fatigue endurance and safety factor for a specific type of arrangement and material type, as well as the equivalent stress distribution, including taking into account a sign. The research shows that the most realistic results can be achieved when modeling a device in the “abutment – implant – base” arrangement. The study demonstrates that strength characteristics crucial for product destruction are described by the maximum principal stresses, and the studied implant configuration ensures its longstanding proper functioning in the case of its production exceptionally from nanostructured titanium with enhanced properties.

Keywords: dental implant; finite-element method; nanostructured materials; titanium; strength; fatigue properties.

Acknowledgments: N.A. Enikeev is grateful to the support of the research laboratory of Eurasian REC “Metals and Alloys under the Extreme Conditions” of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “USATU” within the state assignment (agreement No. 075-03-2021-014/4) of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: Kapustin A.V., Enikeev N.A. Finite-element simulation of fatigue behavior of a medical implant produced from titanium in the large-grained and nanostructured states. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 85–95. DOI: [10.18323/2782-4039-2022-3-1-85-95](https://doi.org/10.18323/2782-4039-2022-3-1-85-95).

Механические свойства, электропроводность и термостабильность проволоки из сплавов системы Al–Fe, полученных литьем в электромагнитный кристаллизатор

© 2022

Медведев Андрей Евгеньевич^{*1}, кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник*Жукова Ольга Олеговна*², аспирант кафедры материаловедения и технологии материалов*Федотова Дарья Дмитриевна*, бакалавр кафедры материаловедения и технологии материалов*Мурашкин Максим Юрьевич*³, кандидат технических наук, старший научный сотрудник

Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

*E-mail: medvedev.ae@ugatu.su

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8616-0042>²ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1879-9389>³ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9950-0336>

Поступила в редакцию 25.04.2022

Принята к публикации 20.07.2022

Аннотация: Разработка и производство новых материалов на основе алюминия является актуальной задачей современной промышленности. В частности, требуются новые материалы для производства легких, прочных и термически стабильных проводов и кабелей для бытового использования, транспортной и энергетической сферы. В работе представлены результаты исследования микроструктуры и физико-механических свойств проволоки из сплавов Al–0,5Fe и Al–1,7Fe (масс. %), полученных непрерывным литьем в электромагнитный кристаллизатор (ЭМК). Проведен сравнительный анализ свойств исследованных сплавов с коммерческими сплавами. В ходе данного исследования проволоку диаметром 3 мм изготавливали из исходных литых заготовок методом холодного волочения (ХВ). Анализ микроструктуры показал, что в результате использования метода литья в ЭМК в процессе кристаллизации образуются частицы фазы Al₂Fe метастабильной модификации, имеющие близкие к нанометрическому диапазону размеры. Использование ХВ привело к формированию в обоих сплавах субструктуры и дополнительному измельчению интерметаллидных частиц, что обеспечило значительное упрочнение образцов сплавов. После ХВ интерметаллидные частицы измельчаются и распределяются по границам зерен/субзерен. Предел прочности при растяжении проволоки из сплава Al–0,5Fe составил 204 МПа, а в сплаве Al–1,7Fe он достиг 295 МПа. Уровень электропроводности проволоки сплавов Al–0,5Fe и Al–1,7Fe составил 58,4 и 52,0 % IACS соответственно. Показано, что проволока из сплавов системы Al–Fe с концентрацией железа до 1,7 масс. % демонстрирует термическую стабильность на уровне термостойких проводниковых сплавов системы Al–Zr и Al–P3M.

Ключевые слова: сплавы системы Al–Fe; литье в электромагнитный кристаллизатор; холодное волочение; интерметаллидные частицы; механические свойства; электропроводность, термостабильность.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 20-79-10133. Исследовательская часть работы выполнена с использованием оборудования ЦКП «Нанотех» ФГБОУ ВО «УГАТУ». Авторы выражают благодарность доктору технических наук, профессору В.Н. Тимофееву (Сибирский федеральный университет) за предоставление материала исследования.

Для цитирования: Медведев А.Е., Жукова О.О., Федотова Д.Д., Мурашкин М.Ю. Механические свойства, электропроводность и термостабильность проволоки из сплавов системы Al–Fe, полученных литьем в электромагнитный кристаллизатор // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 96–105. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-96-105.

ВВЕДЕНИЕ

За последние десятилетия значительно расширилось применение кабельной продукции из алюминиевых сплавов с содержанием железа в интервале от 0,3 до 1,5 масс. %, например, таких марок, как 8030 и 8176. Так, в работе [1] было продемонстрировано, что добавки небольшого (до 0,9 масс. %) количества железа заметно повышают прочность и пластичность алюминия после деформационной обработки, не приводя к значительному снижению электропроводности. В работах [2; 3] показано, что применение интенсивной пластической деформации к алюминиевым сплавам, содержащим 2 масс. % Fe, позволяет добиться повышения пластичности данных сплавов и волочить проволоку диаметром

до 0,08 мм. Подобные особенности делают сплавы Al–Fe привлекательными для автомобильной промышленности, где требуется получение многожильных кабелей, обладающих небольшой массой и сохраняющих удовлетворительный уровень прочности (предел прочности выше 600 МПа) и электропроводности (не менее 50 % IACS). Несмотря на то, что данный способ является лабораторным и не представляет интереса с промышленной точки зрения, он позволяет оценить потенциал сплавов данной системы. Что касается чистого алюминия, то на данный момент он исчерпал потенциал улучшения комплекса своих физико-механических свойств: в работе [4] было показано, что вне зависимости от обработки предел текучести и электропроводность чистого алюминия не превышают 100 МПа

и 61,5 % IACS соответственно. Сплавы системы Al–Fe широко применяются в качестве проводников в линиях электропередач при строительстве жилых и промышленных зданий, а также в бортовой проводке различных транспортных систем. Такое широкое распространение обусловлено низкой стоимостью и привлекательным комплексом физико-механических свойств данных сплавов. Так, в работе [5] авторы за счет комбинации холодного волочения (ХВ) и старения добились предела прочности проволоки из сплава Al–1,13 масс. % Fe в 200 МПа и уровня электропроводности в 59 % IACS. Подобные свойства достигаются за счет значительного уменьшения среднего размера зерна в центральной части проволоки, а также формирования деформационной текстуры в направлении $\langle 111 \rangle$ [6]. Авторы [7] показали, что волочение алюминиевой проволоки до диаметра 0,15 мм реализуемо при добавлении не более чем 0,5 масс. % Fe, что одновременно повышает прочность проволоки без существенной потери электропроводности. Проводники, изготовленные из материалов на основе алюминия, обладают малым весом, высоким качеством и безопасностью, достаточной электропроводностью и относительно низкой стоимостью. Однако их использование сдерживается относительно низкой механической прочностью, что ставит алюминиевые сплавы в проигрышную позицию относительно медных сплавов.

Прочность алюминия традиционно повышается за счет создания сплавов на его основе, и сплавы системы Al–Mg–Si являются одними из самых востребованных алюминиевых сплавов благодаря сочетанию прочности и электропроводности. Так, в работе [8] было показано, что сплавы системы Al–Mg–Si после волочения, закалки и старения характеризуются пределом текучести в 150 МПа и электропроводностью 58,7 % IACS. Авторы [9] продемонстрировали, что системы Al–Mg–Si очень востребованы в качестве материала для электропроводников в транспортных системах. Авторы также рассмотрели вопросы коррозии данных сплавов и пришли к выводу, что применение равноканального углового прессования положительно сказывается на коррозионной стойкости сплавов. Тем не менее, даже обладая улучшенными эксплуатационными характеристиками, сплавы системы Al–Mg–Si не могут считаться заменой медным проводникам, так как не обеспечивают требуемый уровень прочности и электропроводности.

В связи с этим наибольший практический интерес представляет задача разработки проводниковых алюминиевых сплавов, обладающих наряду с хорошей электропроводностью, высокими прочностными характеристиками, а также повышенной термостойкостью. Исследования последних нескольких лет показали, что использование для достижения этой задачи сплавов системы Al–Fe может быть весьма перспективным, поскольку они относительно недороги и обладают потенциалом для дальнейшего улучшения физико-механических и эксплуатационных свойств. Кроме того, железо, имея близкую к нулю растворимость в алюминии, нивелирует влияние твердого раствора на электропроводность этих сплавов [10].

Известно, что традиционные виды литья, такие, например, как литье в кокиль (металлическую форму) с охлаждением, могут приводить к образованию грубых интерметаллидных частиц, вызывающих преждевре-

менное разрушение при обработке деформационными методами, такими как волочение, прокатка и т. п. В недавно выполненных исследованиях [11–13] было показано, что использование метода непрерывного литья в электромагнитный кристаллизатор (ЭМК) позволяет формировать интерметаллидные фазы нанометрического диапазона размеров и обеспечивает их однородное распределение в алюминии за счет высокой скорости охлаждения, достигающей 10^3 – 10^4 К/с.

Известно, что существующие проводниковые сплавы системы Al–Fe не относятся к числу прочных. Проводниковые сплавы систем Al–Mg–Si, Al–Zr и Al–PЗМ (где PЗМ=La, Ce и т. д.) характеризуются более высоким уровнем механической прочности [14–16]. Поэтому в последнее время были предприняты попытки улучшить комплекс свойств сплавов Al–Fe путем управления микроструктурой [17; 18].

Цель исследования – установление возможности повышения/улучшения комплекса свойств (прочности, электропроводности и термостойкости) проводниковых сплавов системы Al–Fe в сравнении с традиционно используемыми в электротехнике алюминиевыми сплавами за счет варьирования содержания железа и применения нового метода литья при их получении, в сочетании с методом холодного волочения, широко используемого для получения электрических проводников в кабельной промышленности.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исходные прутки диаметром 11 мм и длиной более 2 м из сплавов системы Al–Fe с содержанием железа 0,5 и 1,7 масс. % были изготовлены методом непрерывного литья в ЭМК. Химический состав представлен в таблице 1.

Таблица 1. Химический состав сплавов системы Al–Fe, масс. %

Table 1. Chemical composition of Al–Fe alloys, wt. %

Сплав	Si	Fe	Cu	Mg	Zn	Al
Al–0,5Fe	0,04	0,50	0,01	0,01	0,02	Остальное
Al–1,7Fe	0,03	1,65	0,01	0,00	0,03	Остальное

Образцы исследования были приготовлены из алюминия марки А85 и добавки мастер-сплава Fe₈₀Al₂₀ в пропорциях, подобранных для соответствия требуемой концентрации железа. После достижения температуры расплава более 800 °С производилось непрерывное литье в установку ЭМК со скоростью 12,4 мм/с [11–13].

Литые заготовки обрабатывали холодным волочением до диаметра 3 мм за 8 проходов.

Для выявления уровня термостабильности образцы проволоки отжигали в атмосферной печи Nabertherm В 180 при температуре 230 °С в течение 1 ч в соответствии с требованиями стандарта IEC 62004:2007.

Просвечивающую электронную микроскопию (ПЭМ) проводили для анализа микроструктуры с использованием микроскопа JEM 2100 фирмы Jeol. Объекты

исследований готовили методом электрополировки на установке Struers Tenipol-5 в электролите, содержащем 20 % азотной кислоты и 80 % метанола, при температуре около $-25\text{ }^{\circ}\text{C}$ и рабочем напряжении 20 В. Во всех состояниях микроструктуру образцов сплавов изучали в продольном сечении.

Сканирующую электронную микроскопию (СЭМ) проводили на микроскопе JEOL JSM-6490LV при ускоряющем напряжении 15 кВ. Химический состав вторых фаз анализировали методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDXS) с использованием приставки к электронному микроскопу INCA X-Act фирмы Oxford Instruments Company.

Для обработки изображений и количественных изменений элементов микроструктуры (средний размер зерна, средний размер частиц вторых фаз) применяли программное обеспечение ImageJ и программный пакет Grain Size.

Рентгенофазовый анализ (РФА) сплавов проводили на дифрактометре Bruker D8 Discover с использованием $\text{Cu-K}\alpha$ -излучения.

Определение механических характеристик исходных литых заготовок исследуемых материалов осуществляли по результатам статических испытаний на растяжение цилиндрических образцов с диаметром рабочей части 3 мм и длиной рабочей части 15 мм в соответствии с ГОСТ 1497-84.

Механические характеристики образцов проволоки определяли по результатам испытаний на растяжение образцов с длиной рабочей части 200 мм в соответствии с ГОСТ 10446-80.

Для получения статистически надежных результатов испытывали не менее 3 образцов каждого исследуемого состояния.

Механические испытания образцов проводили на универсальном динамометре Instron 5982. По результатам испытаний определяли величину условного предела текучести ($\sigma_{0,2}$), предела прочности при растяжении (σ_B) и пластичность, измеренную как удлинение до разрыва (δ).

Удельное электрическое сопротивление (УЭС) литых заготовок и проволоки определяли согласно ГОСТ

7229-76 с помощью микроомметра БСЗ-010-3 (класс точности 0,2). Для замеров отбирали выпрямленные образцы длиной не менее 1 м в измеряемой части.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Эволюция микроструктуры в результате деформационной обработки

На рис. 1 представлена микроструктура заготовок сплавов Al-0,5Fe и Al-1,7Fe в исходном состоянии – после литья в ЭМК.

Анализ изображений, полученных методом СЭМ, показал, что в алюминиевой матрице присутствуют включения интерметаллидной фазы, образовавшейся в процессе кристаллизации. Ее объемная доля в сплаве Al-0,5Fe составляет $2,9\pm 1,5\%$, а в сплаве Al-1,7Fe – $9,6\pm 2,7\%$ соответственно. В сплаве Al-1,7Fe частицы второй фазы образуют сплошную сетку с размером ячейки $3,8\pm 0,2\text{ }\mu\text{m}$ (рис. 1 б), а в сплаве Al-0,5Fe сетка интерметаллидов имеет средний размер ячейки $5,8\pm 0,6\text{ }\mu\text{m}$ (рис. 1 а). Поскольку Fe не образует твердого раствора с Al [19; 20], предполагается, что объемная доля интерметаллидов в обоих сплавах будет оставаться неизменной после осуществления ХВ.

Анализ изображений микроструктуры сплавов в исходном состоянии, выполненный методом ПЭМ (рис. 2), показал, что границы ячеек, образованные интерметаллидной фазой (рис. 1), состоят из непрерывных цепочек частиц, ориентированных в определенном направлении. В основном они имеют форму тонких стержней, толщина которых составляет около 150 нм, а длина колеблется от 200 до 1500 нм.

В результате РСА было установлено, что в обоих сплавах, полученных литьем в ЭМК, присутствует интерметаллидная фаза (рис. 3). На полученных рентгенограммах отчетливо видны пики от нее в диапазоне углов по 2θ между пиками (111) и (200) от алюминия. Отмеченное увеличение интенсивности рентгеновских пиков от второй фазы в сплаве Al-1,7Fe свидетельствует об увеличении ее содержания с повышением концентрации Fe,

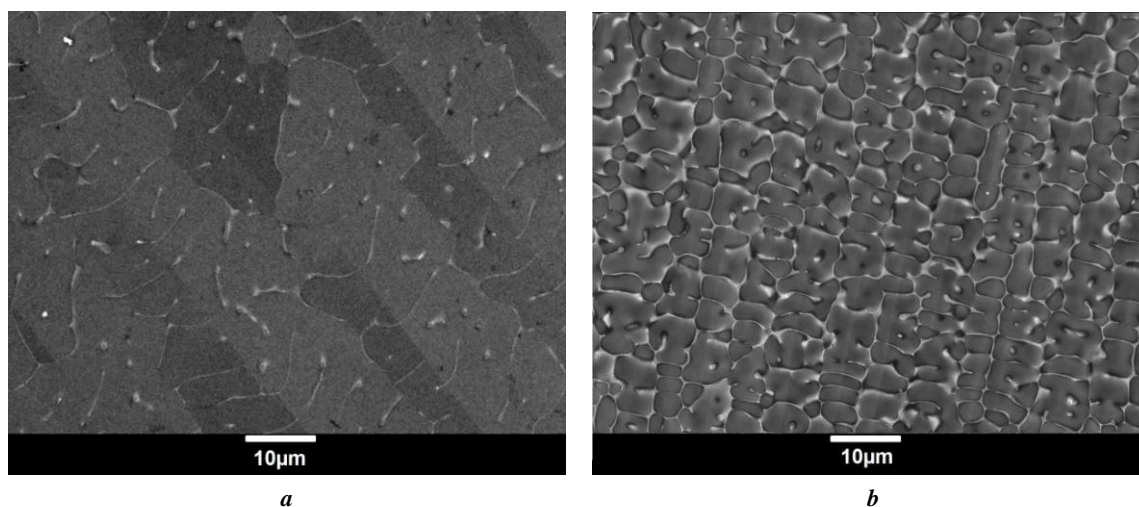


Рис. 1. Микроструктура сплавов Al-0,5Fe (а) и Al-1,7Fe (б) в исходном состоянии (метод СЭМ)
Fig. 1. The microstructure of Al-0.5Fe (a) and Al-1.7Fe (b) alloys in the initial state (SEM method)

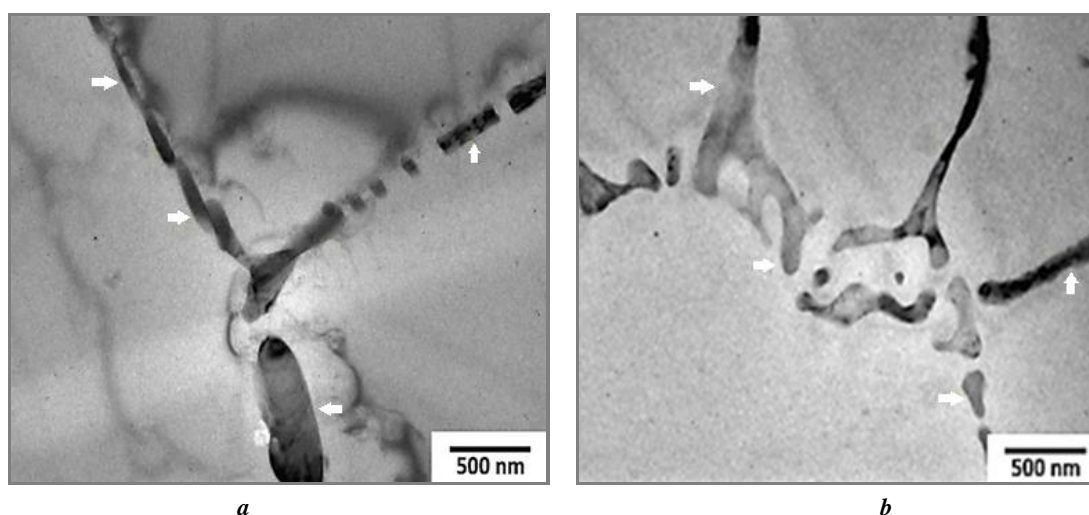


Рис. 2. Микроструктура сплавов Al–0,5Fe (a) и Al–2,5Fe (b) в исходном состоянии, ПЭМ. Стрелками обозначены интерметаллидные частицы
Fig. 2. The microstructure of Al–0.5Fe (a) and Al–2.5Fe (b) alloys in the initial state, TEM. Arrows indicate intermetallic particles

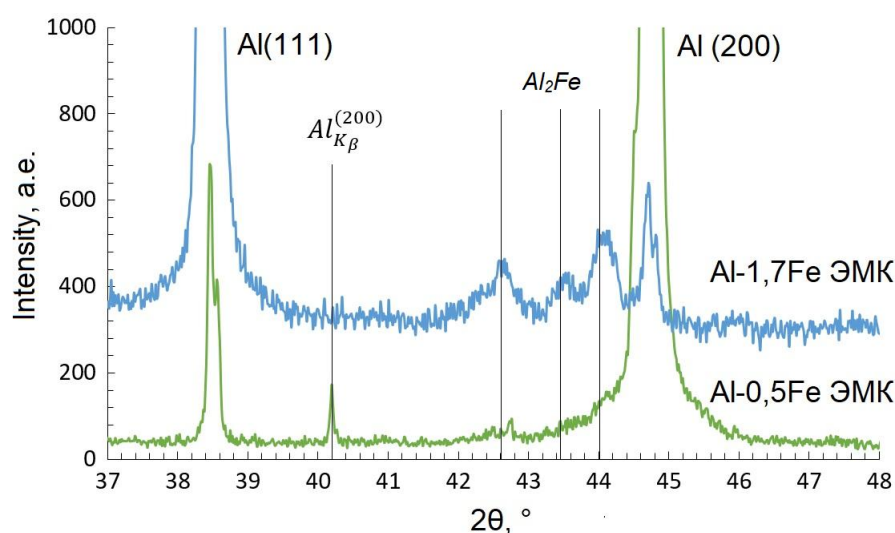


Рис. 3. Профили рентгенограмм, полученные в результате РСА образцов сплавов Al–0,5Fe и Al–1,7Fe в исходном состоянии
Fig. 3. X-ray profiles produced by the XRD of specimens of Al–0.5Fe and Al–1.7Fe alloys in the initial state

что согласуется с данными выполненного количественного анализа микроструктуры (рис. 1). Индексация пиков позволила установить, что обнаруженное соединение весьма близко к интерметаллидной фазе Al_2Fe метастабильной модификации. Признаков наличия в микроструктуре сплавов частиц ни стабильной фазы $Al_{13}Fe_4$, ни метастабильной фазы Al_6Fe , характерных для сплавов системы Al–Fe [20], обнаружено не было. Образование в материалах исследования частиц именно метастабильной модификации обусловлено высокой скоростью их охлаждения при кристаллизации [20], которая составляла более 10^3 К/с.

На рис. 4 представлена микроструктура образцов проволоки из сплава Al–0,5Fe, полученная в результате ХВ. Видно, что после такой деформационной обработки в алюминиевой матрице сформировалась структура, со-

стоящая из вытянутых в направлении волочения зерен. Поперечный размер зерен составляет 300–700 нм, а длина достигает нескольких микрон (рис. 4 а). На темнопольных изображениях (рис. 4 b, 4 с) отчетливо видно, что часть частиц расположена по границам зерен. При ближайшем рассмотрении становится заметно, что частицы расположены в виде скоплений – предположительно, вдоль исходных тонких стержней, раздробившихся в результате ХВ (рис. 4 с, 4 d).

На рис. 5 представлена микроструктура сплава Al–1,7Fe после ХВ. Сопоставительный анализ показал, что микроструктура проволоки этого сплава качественно подобна таковой, наблюдаемой в проволоке сплава Al–0,5Fe (рис. 4 а, 4 b и рис. 5 а, 5 b). Интерметаллидные частицы в результате деформационной обработки

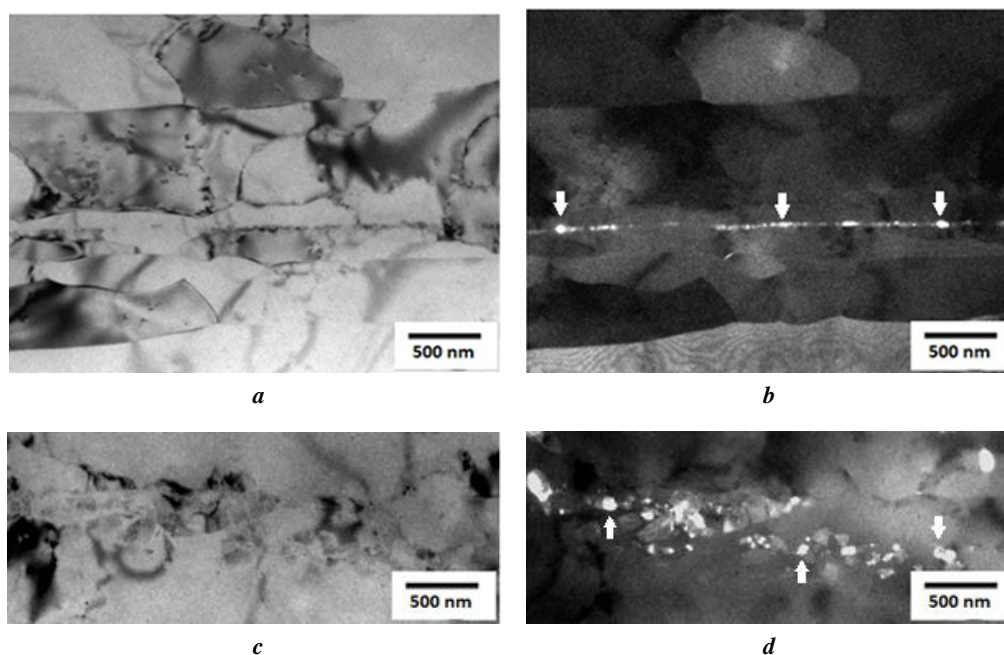


Рис. 4. Микроструктура образца проволоки из сплава Al–0,5Fe после холодного волочения в продольном сечении, ПЭМ: *a, c* – светлопольные изображения микроструктуры; *b, d* – темнопольные изображения микроструктуры
Fig. 4. The microstructure of a specimen of a Al–0.5Fe alloy wire after cold drawing in the longitudinal section, TEM: *a, c* – bright-field microstructure images; *b, d* – dark-field microstructure images

претерпели измельчение и переориентировались в направлении волочения. В продольном сечении проволоки отмеченная эволюция частиц интерметаллидных фаз сопровождается формированием волокнистой структуры в алюминиевой матрице. Ширина волокон в проволоке сплава Al–1,7Fe заметно меньше, чем в сплаве Al–0,5Fe. Она составляет 150–300 нм. Длина волокон также меньше и не превышает 1,5 мкм. О формировании в проволоке структуры субзеренного типа, образованной преимущественно границами, имеющими малоугловую разориентацию, свидетельствуют картины электронной дифракции, одна из которых приведена на рис. 5 а. Она представляет собой одиночные рефлекссы, которые имеют сильно выраженное азимутальное размытие. Отмеченный тип/вид субструктуры в образцах проволоки сплавов системы Al–Fe, сформировавшейся в результате ХВ, подобен микроструктуре, сформированной в проволоке из проводникового сплава 6101 системы Al–Mg–Si, полученной в результате подобной деформационной обработки [21].

Помимо переориентации интерметаллидных частиц в продольном сечении, ХВ привело к их дроблению и изменению их морфологии: если в исходном состоянии частицы имеют форму пластин/стержней (рис. 1), то после волочения принимают форму, близкую к сферической, хоть и с явно выраженными гранями (рис. 4, рис. 5).

Эволюция механических и электрических свойств в результате деформационной обработки

В исходном литом в ЭМК состоянии материалы исследования характеризуются относительно низкими значениями предела прочности при растяжении (таблица 2) с тенденцией к росту с увеличением концентрации Fe в алюминии (с 90 до 150 МПа). Изменение электро-

проводности демонстрирует обратную зависимость: увеличение содержания Fe приводит к уменьшению электропроводности (с 57,8 до 49,6 % IACS). Это вполне ожидаемо, так как увеличение объемной доли частиц интерметаллидной фазы и, следовательно, возрастание протяженности межфазных границ создает дополнительные препятствия на пути движения дислокаций и электронов проводимости, увеличивает прочность и снижает электрическое сопротивление материалов исследования [3; 9; 10]. Кроме того, более низкие значения электропроводности сплава Al–1,7Fe объясняются меньшим количеством в нем электропроводящей основы – алюминия. Влиянием же твердого раствора на уровень электрической проводимости в несмешиваемой системе Al–Fe [20] можно пренебречь.

Механические и электрические свойства проволоки из сплавов Al–Fe, полученной в результате ХВ, а также после специального отжига при 230 °С, произведенного для оценки ее термостабильности, представлены в таблице 2. Сплавы Al–0,5Fe и Al–1,7Fe демонстрируют повышение механической прочности после волочения: предел прочности проволоки в сравнении с исходной заготовкой увеличивается в 2 раза для сплава Al–1,7Fe и в 2,2 раза для сплава Al–0,5Fe. Относительное удлинение до разрыва проволоки из обоих сплавов составляет около 5 % и является весьма хорошим показателем для токопроводящих жил из проводниковых алюминиевых сплавов¹. Электропроводность полученной методом ХВ проволоки также претерпевает некоторое увеличение, более выраженное в случае сплава Al–1,7Fe. Одной из вероятных причин такого изменения электропроводности может являться устранение микронесплошностей

¹ IEC 62004:2007 Thermal-resistant aluminium alloy wire for overhead line conductor.

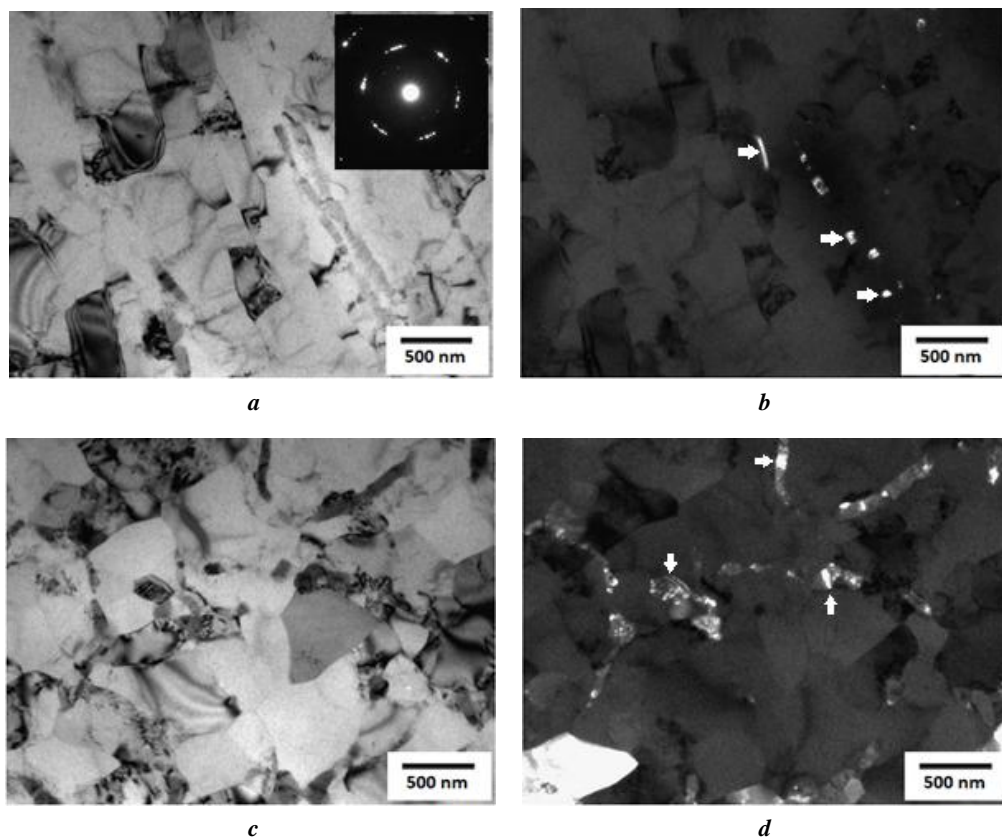


Рис. 5. Микроструктура проволоки сплава Al–1,7Fe после холодного волочения в продольном (a, b) и поперечном (c, d) сечениях, ПЭМ: a, c – светлопольные изображения; b, d – темнопольные изображения
Fig. 5. The microstructure of a Al–1.7Fe alloy wire after cold drawing in the longitudinal (a, b) and cross (c, d) sections, TEM: a, c – bright-field microstructure images; b, d – dark-field microstructure images

Таблица 2. Физико-механические свойства сплавов системы Al–Fe
Table 2. Physical and mechanical properties of Al–Fe alloys

Сплав	Состояние	Электрические свойства		Механические свойства		
		УЭС, нОм·м	IACS, %	$\sigma_{0,2}$, МПа	σ_B , МПа	δ , %
Al–0,5Fe	ЭМК	29,83±0,01	57,8	35±3	90±7	32,5±3,4
Al–1,7Fe		34,78±0,01	49,6	60±6	150±11	28,8±2,1
Al–0,5Fe	ХВ Ø3 мм	29,54±0,01	58,4	170±12	204±14	5,3±0,2
Al–1,7Fe		33,15±0,01	52,0	235±18	295±19	4,9±0,5
Al–0,5Fe	ХВ+230 °С	29,15±0,01	59,2	175±11	200±16	4,6±0,4
Al–1,7Fe		32,62±0,01	52,8	250±14	315±17	3,9±0,3
AA8176 ASTM B800	–	–	60,6	–	103–152	–
AL2 EN 50183	–	–	52,5	–	315	–
AT1 IEC 62004:2007	–	–	60	–	155–169	–
AT2 IEC 62004:2007	–	–	55	–	225–248	–

(микропор), образовавшихся в процессе кристаллизации сплавов, в результате деформационной обработки.

Специальный отжиг при температуре 230 °С в течение 1 ч не приводит к заметному разупрочнению проволоки сплава Al–0,5Fe и вызывает даже некоторое увеличение прочности образцов проволоки из сплава Al–1,7Fe. Этот обнаруженный интересный феномен будет изучен нами в дальнейшем, так как требует более глубокого изучения микроструктурных особенностей материала. Отжиг также приводит к незначительному увеличению электропроводности (на 0,6–0,8 % IACS), что может быть объяснено снижением плотности дефектов кристаллического строения деформированной структуры проволок, инициированного воздействием температуры. Отмеченное изменение механической прочности и электропроводности в результате специального отжига свидетельствует о том, что проволока из сплавов Al–0,5Fe и Al–1,7Fe, полученная литьем в ЭМК, пригодна для непрерывного длительного использования при температуре 150 °С в соответствии с IEC 62004:2007.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Существует компромисс между механической прочностью, электропроводностью и термической стабильностью проводниковых сплавов на основе алюминия [5]. Конкурентный характер этих свойств заставляет исследователей искать точку равновесия между ними. Как правило, деформационная обработка обеспечивает уменьшение размера зерен/субзерен и увеличивает количество структурных дефектов, что приводит к значительному упрочнению материалов при гораздо менее выраженном снижении электропроводности [22]. Термическая обработка, в свою очередь, зачастую дает противоположный эффект, приводя к разупрочнению материала и повышению электропроводности.

Разнообразие микроструктурных особенностей, влияющих на механическую прочность, электрическую проводимость и термическую стабильность, позволяет более точно проектировать результирующую комбинацию этих свойств. Известно, что не только размер зерен/субзерен и плотность дислокаций влияют на свойства. Наличие твердого раствора на основе алюминия по-разному влияет на механическую прочность проводников в зависимости от природы и концентрации легирующих элементов, сильно снижая и, по существу, контролируя их электропроводность. Наличие интерметаллических частиц, их морфология, объемная доля, размеры и распределение также влияют на свойства сплавов. Считается, что интерметаллидные частицы в сплавах более заметно влияют на механическую прочность и термостабильность, но незначительно – на электропроводность. Это происходит потому, что частицы могут препятствовать миграции дислокаций и межзеренных границ/субграниц, в том числе и при температурных воздействиях, влияя таким образом на стабильность плотности дефектов кристаллического строения. В свою очередь, образование, выделение и рост интерметаллидных частиц зависят от степени пересыщенности твердого раствора, скорости кристаллизации, а также условий последующих деформационных и термических воздействий.

Известно, что сплавы системы Al–Fe характеризуются крайне низкой, сопоставимой с нулевой, растворимостью железа в алюминиевой матрице, что сводит на нет влияние твердого раствора на физико-механические свойства данных сплавов [20]. Кроме того, твердый раствор в сплавах данной системы не образуется в процессе реализации традиционных видов деформационной или деформационно-термической обработки.

В работах [17; 23] было показано, что именно дисперсные интерметаллидные частицы обеспечивают достижение высокой прочности и термостабильности в проводниковых сплавах, легированных железом или редкоземельными элементами. Применение метода литья в ЭМК позволяет повысить дисперсность интерметаллидной фазы в алюминиевых сплавах, создав предпосылки для формирования наноразмерных частиц в исследуемом материале после деформационной обработки [11; 12; 23]. Таким образом, только лишь за счет применения такого метода литья можно достичь высокой дисперсности упрочняющих частиц и, как следствие, высокой прочности.

Сплав Al–0,5Fe, полученный методом ХВ, демонстрирует предел прочности около 200 МПа и уровень электропроводности 58,4 % IACS (таблица 2). Полученный в данном исследовании сплав Al–1,7Fe, отлитый в ЭМК и подвергнутый ХВ, демонстрирует предел прочности около 300 МПа и уровень электропроводности 52,8 % IACS (таблица 2).

По сравнению с широко используемыми сплавами системы Al–Fe (например, сплавом марки 8176), предложенное нами сочетание методов изготовления проволоки позволяет добиться значительно большего уровня прочности и термостабильности при сохранении удовлетворительной электрической проводимости. Кроме того, полученные в данном исследовании образцы проволоки из сплава Al–1,7Fe по уровню свойств составляют конкуренцию высокопрочным проводниковым сплавам системы Al–Mg–Si, заметно превосходя их уровень термостабильности. Помимо очевидно более привлекательного сочетания свойств, используемые в качестве материалов исследования сплавы системы Al–Fe, по сравнению со сплавами Al–Mg–Si, более просты в получении из них токопроводящих элементов (в нашем случае проволоки). Для их производства не требуется осуществление таких видов термической обработки, как отжиг с последующей закалкой (обработка на твердый раствор), и финальной упрочняющей обработки (искусственного старения).

Полученные в данном исследовании образцы проволоки из сплавов Al–Fe по уровню прочности, электропроводности и термостабильности также составляют конкуренцию термостойким сплавам типа AT1 и AT2 системы Al–Zr. Как и в случае сплавов Al–Mg–Si, при производстве проводников из сплавов системы Al–Zr, как правило, требуется длительный отжиг, обеспечивающий выделение наноразмерных частиц фазы Al₃Zr. Для проводников из сплавов Al–Fe, полученных литьем в ЭМК, такой отжиг не требуется, так как дисперсные частицы фазы Al₂Fe, обеспечившие термическую стабильность микроструктуры и, соответственно, свойств, были сформированы на этапе получения исходного материала (в процессе литья в ЭМК).

Впервые полученные в данном исследовании результаты позволяют надеяться на дальнейшую разработку новых материалов электротехнического и конструкционного назначения на основе сплавов системы Al-Fe, полученных с использованием литья в ЭМК, в сочетании с различными методами деформационной и/или деформационно-термической обработки.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Установлено, что использование литья в ЭМК позволяет формировать в алюминиевой матрице дисперсные интерметаллидные частицы метастабильной фазы Al₂Fe в виде тонких/дисперсных пластин толщиной 150 нм.

2. Обнаружено, что холодное волочение привело к увеличению предела прочности сплавов Al-0,5Fe и Al-1,7Fe (до 204 и 295 МПа соответственно) без заметной потери электропроводности.

3. Выявлено, что повышение прочности сплавов при сохранении их электропроводности происходит вследствие измельчения частиц интерметаллидной фазы и их перераспределения в объеме материала, формирования субструктуры в алюминиевой матрице и не сопровождается образованием твердого раствора железа в алюминии.

4. Показано, что проволоку из сплавов системы Al-Fe с содержанием Fe до 1,7 масс. %, полученных методом литья в ЭМК, можно рассматривать как более дешевую замену высокопрочным сплавам системы Al-Mg-Si, обладающую при этом улучшенной термической стабильностью.

5. Впервые показано, что проволока из сплавов системы Al-Fe, полученных литьем в ЭМК, демонстрирует термическую стабильность свойств, сопоставимую с коммерчески используемыми сплавами АТ1 и АТ2 системы Al-Zr.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Shikagawa T., Itoh G., Suzuki S., Kuroda H., Horikoshi T. Effect of small additions of Fe on the tensile properties and electrical conductivity of aluminium wires // *Materials Science Forum*. 2016. Vol. 519-521. P. 515–518. DOI: [10.4028/www.scientific.net/msf.519-521.515](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/msf.519-521.515).
- Cubero-Sesin J.M., Horita Z. Age Hardening in Ultrafine-Grained Al-2PctFe Alloy Processed by High-Pressure Torsion // *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*. 2015. Vol. 46. № 6. P. 2614–2624. DOI: [10.1007/s11661-015-2876-6](https://doi.org/10.1007/s11661-015-2876-6).
- Cubero-Sesin J.M., In H., Arita M., Iwaoka H., Horita Z. High-pressure torsion for fabrication of high-strength and high-electrical conductivity Al micro-wires // *Journal of Materials Science*. 2014. Vol. 49. № 19. P. 6550–6557. DOI: [10.1007/s10853-014-8240-1](https://doi.org/10.1007/s10853-014-8240-1).
- Cai S.L., Wan J.C., Hao Y.J., Koch C.C. Dual gradient microstructure to simultaneously improve strength and electrical conductivity of aluminum wire // *Materials Science and Engineering A*. 2020. Vol. 783. Article number 139308. DOI: [10.1016/j.msea.2020.139308](https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.139308).
- Hou J.P., Li R., Wang Q., Yu H.Y., Zhang Z.J., Chen Q.Y., Ma H., Li X.W., Zhang Z.F. Origin of abnormal strength-electrical conductivity relation for an Al-Fe alloy wire // *Materialia*. 2019. Vol. 7. Article number 100403. DOI: [10.1016/j.mtla.2019.100403](https://doi.org/10.1016/j.mtla.2019.100403).
- Zhu Y.K., Chen Q.Y., Wang Q., Yu H.Y., Li R., Hou J.P., Zhang Z.J., Zhang G.P., Zhang Z.F. Effect of stress profile on microstructure evolution of cold-drawn commercially pure aluminum wire analyzed by finite element simulation // *Journal of Materials Science and Technology*. 2019. Vol. 34. № 7. P. 1214–1221. DOI: [10.1016/j.jmst.2017.07.011](https://doi.org/10.1016/j.jmst.2017.07.011).
- Jablonski M., Knych T., Smyrak B. New aluminium alloys for electrical wires of fine diameter for automotive industry // *Archives of Metallurgy and Materials*. 2009. Vol. 54. № 3. P. 671–676.
- Zhang J., Ma M., Shen F., Yi D., Wang B. Influence of deformation and annealing on electrical conductivity, mechanical properties and texture of Al-Mg-Si alloy cables // *Materials Science and Engineering A*. 2018. Vol. 710. P. 27–37. DOI: [10.1016/j.msea.2017.10.065](https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.10.065).
- Rochet C., Andrieu E., Arfaei B., Harouard J.-P., Laurino A., Lowe T.C., Odemer G., Blanc C. Influence of equal-channel angular pressing on the corrosion fatigue behaviour of an Al-Mg-Si aluminium alloy for automotive conductors // *International Journal of Fatigue*. 2020. Vol. 140. Article number 105812. DOI: [10.1016/j.ijfatigue.2020.105812](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2020.105812).
- Valiev R.Z., Murashkin M., Sabirov I. A nanostructural design to produce high-strength Al alloys with enhanced electrical conductivity // *Scripta Materialia*. 2014. Vol. 76. P. 13–16. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2013.12.002](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2013.12.002).
- Belov N., Murashkin M., Korotkova N., Akopyan T., Timofeev V. Structure and properties of Al-0.6 Wt.%Zr wire alloy manufactured by direct drawing of electromagnetically cast wire rod // *Metals*. 2020. Vol. 10. № 6. P. 1–11. Article number 769. DOI: [10.3390/met10060769](https://doi.org/10.3390/met10060769).
- Belov N., Akopyan T., Korotkova N., Murashkin M., Timofeev V., Fortuna A. Structure and properties of Ca and Zr containing heat resistant wire aluminum alloy manufactured by electromagnetic casting // *Metals*. 2021. Vol. 11. № 2. P. 1–15. Article number 236. DOI: [10.3390/met11020236](https://doi.org/10.3390/met11020236).
- Korotkova N.O., Belov N.A., Timofeev V.N., Motkov M.M., Cherkasov S.O. Influence of Heat Treatment on the Structure and Properties of an Al-7% REM Conductive Aluminum Alloy Casted in an Electromagnetic Crystallizer // *Physics of Metals and Metallography*. 2020. Vol. 121. № 2. P. 173–179. DOI: [10.1134/S0031918X2002009X](https://doi.org/10.1134/S0031918X2002009X).
- Ding H., Xiao Y., Bian Z., Wu Y., Yang H., Wang H., Wang H. Design, microstructure, and thermal stability of a novel heat-resistant Al-Fe-Ni alloy manufactured by selective laser melting // *Journal of Alloys and Compounds*. 2021. Vol. 885. Article number 160949. DOI: [10.1016/j.jallcom.2021.160949](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.160949).
- Bian Z., Dai S., Wu L., Chen Z., Wang M., Chen D., Wang H. Thermal stability of Al-Fe-Ni alloy at high temperatures // *Journal of Materials Research and Technology*. 2019. Vol. 8. № 3. P. 2538–2548. DOI: [10.1016/j.jmrt.2019.01.028](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2019.01.028).
- Валиев Р.З., Александров И.В. Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства. М.: Академкнига, 2007. 398 с.

17. Medvedev A., Murashkin M., Enikeev N., Medvedev E., Sauvage X. Influence of morphology of intermetallic particles on the microstructure and properties evolution in severely deformed Al-Fe alloys // *Metals*. 2021. Vol. 11. № 5. Article number 815. DOI: [10.3390/met11050815](https://doi.org/10.3390/met11050815).
18. Magomedova D.K. Influence of Al 6101 alloy structure on pore formation in static tension as a structural change during deformation // *Materials. Technologies. Design*. 2022. Vol. 4. № 1. P. 24–29. DOI: [10.54708/26587572.2022.41724](https://doi.org/10.54708/26587572.2022.41724).
19. Medvedev A.E., Murashkin M.Y., Enikeev N.A., Valiev R.Z., Hodgson P.D., Lapovok R. Optimization of Strength-Electrical Conductivity Properties in Al-2Fe Alloy by Severe Plastic Deformation and Heat Treatment // *Advanced Engineering Materials*. 2017. Vol. 20. № 3. Article number 1700867. DOI: [10.1002/adem.201700867](https://doi.org/10.1002/adem.201700867).
20. Mondolfo L.F., Zmeskal O. *Engineering metallurgy*. New York: McGraw-Hill, 1955. 397 p.
21. Medvedev A.E., Arutunyan A., Lomakin I., Bondarenko A., Kazykhanov V., Enikeev N., Raab G., Murashkin M. Fatigue properties of ultra-fine grained Al-Mg-Si wires with enhanced mechanical strength and electrical conductivity // *Metals*. 2018. Vol. 8. № 12. Article number 1034. DOI: [10.3390/met8121034](https://doi.org/10.3390/met8121034).
22. Murashkin M.Yu., Sabirov I., Sauvage X., Valiev R.Z. Nanostructured Al and Cu alloys with superior strength and electrical conductivity // *Journal of Materials Science*. 2016. Vol. 51. № 1. P. 33–49. DOI: [10.1007/s10853-015-9354-9](https://doi.org/10.1007/s10853-015-9354-9).
23. Medvedev A.E., Murashkin M.Yu., Enikeev N.A., Bikmukhametov I., Valiev R.Z., Hodgson P.D., Lapovok R. Effect of the eutectic Al-(Ce,La) phase morphology on microstructure, mechanical properties, electrical conductivity and heat resistance of Al-4.5(Ce,La) alloy after SPD and subsequent annealing // *Journal of Alloys and Compounds*. 2019. Vol. 796. P. 321–330. DOI: [10.1016/j.jallcom.2019.05.006](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.05.006).
5. Hou J.P., Li R., Wang Q., Yu H.Y., Zhang Z.J., Chen Q.Y., Ma H., Li X.W., Zhang Z.F. Origin of abnormal strength-electrical conductivity relation for an Al-Fe alloy wire. *Materialia*, 2019, vol. 7, article number 100403. DOI: [10.1016/j.mtla.2019.100403](https://doi.org/10.1016/j.mtla.2019.100403).
6. Zhu Y.K., Chen Q.Y., Wang Q., Yu H.Y., Li R., Hou J.P., Zhang Z.J., Zhang G.P., Zhang Z.F. Effect of stress profile on microstructure evolution of cold-drawn commercially pure aluminum wire analyzed by finite element simulation. *Journal of Materials Science and Technology*, 2019, vol. 34, no. 7, pp. 1214–1221. DOI: [10.1016/j.jmst.2017.07.011](https://doi.org/10.1016/j.jmst.2017.07.011).
7. Jablonski M., Knych T., Smyrak B. New aluminium alloys for electrical wires of fine diameter for automotive industry. *Archives of Metallurgy and Materials*, 2009, vol. 54, no. 3, pp. 671–676.
8. Zhang J., Ma M., Shen F., Yi D., Wang B. Influence of deformation and annealing on electrical conductivity, mechanical properties and texture of Al-Mg-Si alloy cables. *Materials Science and Engineering A*, 2018, vol. 710, pp. 27–37. DOI: [10.1016/j.msea.2017.10.065](https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.10.065).
9. Rochet C., Andrieu E., Arfaei B., Harouard J.-P., Laurino A., Lowe T.C., Odemer G., Blanc C. Influence of equal-channel angular pressing on the corrosion fatigue behaviour of an Al-Mg-Si aluminium alloy for automotive conductors. *International Journal of Fatigue*, 2020, vol. 140, article number 105812. DOI: [10.1016/j.ijfatigue.2020.105812](https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2020.105812).
10. Valiev R.Z., Murashkin M., Sabirov I. A nanostructural design to produce high-strength Al alloys with enhanced electrical conductivity. *Scripta Materialia*, 2014, vol. 76, pp. 13–16. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2013.12.002](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2013.12.002).
11. Belov N., Murashkin M., Korotkova N., Akopyan T., Timofeev V. Structure and properties of Al-0.6 Wt.%Zr wire alloy manufactured by direct drawing of electromagnetically cast wire rod. *Metals*, 2020, vol. 10, no. 6, pp. 1–11, article number 769. DOI: [10.3390/met10060769](https://doi.org/10.3390/met10060769).
12. Belov N., Akopyan T., Korotkova N., Murashkin M., Timofeev V., Fortuna A. Structure and properties of Ca and Zr containing heat resistant wire aluminum alloy manufactured by electromagnetic casting. *Metals*, 2021, vol. 11, no. 2, pp. 1–15, article number 236. DOI: [10.3390/met11020236](https://doi.org/10.3390/met11020236).
13. Korotkova N.O., Belov N.A., Timofeev V.N., Motkov M.M., Cherkasov S.O. Influence of Heat Treatment on the Structure and Properties of an Al-7% REM Conductive Aluminum Alloy Casted in an Electromagnetic Crystallizer. *Physics of Metals and Metallography*, 2020, vol. 121, no. 2, pp. 173–179. DOI: [10.1134/S0031918X2002009X](https://doi.org/10.1134/S0031918X2002009X).
14. Ding H., Xiao Y., Bian Z., Wu Y., Yang H., Wang H., Wang H. Design, microstructure, and thermal stability of a novel heat-resistant Al-Fe-Ni alloy manufactured by selective laser melting. *Journal of Alloys and Compounds*, 2021, vol. 885, article number 160949. DOI: [10.1016/j.jallcom.2021.160949](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.160949).
15. Bian Z., Dai S., Wu L., Chen Z., Wang M., Chen D., Wang H. Thermal stability of Al-Fe-Ni alloy at high temperatures. *Journal of Materials Research and Technology*, 2019, vol. 8, no. 3, pp. 2538–2548. DOI: [10.1016/j.jmrt.2019.01.028](https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2019.01.028).

REFERENCES

1. Shikagawa T., Itoh G., Suzuki S., Kuroda H., Horikoshi T. Effect of small additions of Fe on the tensile properties and electrical conductivity of aluminium wires. *Materials Science Forum*, 2016, vol. 519-521, pp. 515–518. DOI: [10.4028/www.scientific.net/msf.519-521.515](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/msf.519-521.515).
2. Cubero-Sesin J.M., Horita Z. Age Hardening in Ultrafine-Grained Al-2PctFe Alloy Processed by High-Pressure Torsion. *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, 2015, vol. 46, no. 6, pp. 2614–2624. DOI: [10.1007/s11661-015-2876-6](https://doi.org/10.1007/s11661-015-2876-6).
3. Cubero-Sesin J.M., In H., Arita M., Iwaoka H., Horita Z. High-pressure torsion for fabrication of high-strength and high-electrical conductivity Al micro-wires. *Journal of Materials Science*, 2014, vol. 49, no. 19, pp. 6550–6557. DOI: [10.1007/s10853-014-8240-1](https://doi.org/10.1007/s10853-014-8240-1).
4. Cai S.L., Wan J.C., Hao Y.J., Koch C.C. Dual gradient microstructure to simultaneously improve strength and electrical conductivity of aluminum wire. *Materials Science and Engineering A*, 2020, vol. 783, article number 139308. DOI: [10.1016/j.msea.2020.139308](https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.139308).

16. Valiev R.Z., Aleksandrov I.V. *Ob'emnye nanostrukturnye metallicheskie materialy: poluchenie, struktura i svoystva* [Bulk nanostructured metallic materials: preparation, structure and properties]. Moscow, Akademkniga Publ., 2007. 398 p.
17. Medvedev A., Murashkin M., Enikeev N., Medvedev E., Sauvage X. Influence of morphology of intermetallic particles on the microstructure and properties evolution in severely deformed Al-Fe alloys. *Metals*, 2021, vol. 11, no. 5, article number 815. DOI: [10.3390/met11050815](https://doi.org/10.3390/met11050815).
18. Magomedova D.K. Influence of Al 6101 alloy structure on pore formation in static tension as a structural change during deformation. *Materials. Technologies. Design*, 2022, vol. 4, no. 1, pp. 24–29. DOI: [10.54708/26587572_2022_41724](https://doi.org/10.54708/26587572_2022_41724).
19. Medvedev A.E., Murashkin M.Y., Enikeev N.A., Valiev R.Z., Hodgson P.D., Lapovok R. Optimization of Strength-Electrical Conductivity Properties in Al-2Fe Alloy by Severe Plastic Deformation and Heat Treatment. *Advanced Engineering Materials*, 2017, vol. 20, no. 3, article number 1700867. DOI: [10.1002/adem.201700867](https://doi.org/10.1002/adem.201700867).
20. Mondolfo L.F., Zmeskal O. *Engineering metallurgy*. New York, McGraw-Hill, 1955. 397 p.
21. Medvedev A.E., Arutunyan A., Lomakin I., Bondarenko A., Kazykhanov V., Enikeev N., Raab G., Murashkin M. Fatigue properties of ultra-fine grained Al-Mg-Si wires with enhanced mechanical strength and electrical conductivity. *Metals*, 2018, vol. 8, no. 12, article number 1034. DOI: [10.3390/met8121034](https://doi.org/10.3390/met8121034).
22. Murashkin M.Yu., Sabirov I., Sauvage X., Valiev R.Z. Nanostructured Al and Cu alloys with superior strength and electrical conductivity. *Journal of Materials Science*, 2016, vol. 51, no. 1, pp. 33–49. DOI: [10.1007/s10853-015-9354-9](https://doi.org/10.1007/s10853-015-9354-9).
23. Medvedev A.E., Murashkin M.Yu., Enikeev N.A., Bikmukhametov I., Valiev R.Z., Hodgson P.D., Lapovok R. Effect of the eutectic Al-(Ce,La) phase morphology on microstructure, mechanical properties, electrical conductivity and heat resistance of Al-4.5(Ce,La) alloy after SPD and subsequent annealing. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, vol. 796, pp. 321–330. DOI: [10.1016/j.jallcom.2019.05.006](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.05.006).

The mechanical properties, electrical conductivity, and thermal stability of a wire made of Al-Fe alloys produced by casting into an electromagnetic crystallizer

© 2022

Andrey E. Medvedev¹, PhD (Physics and Mathematics), junior researcher
Olga O. Zhukova², postgraduate student of Chair of Materials Science and Materials Technology
Darya D. Fedotova, bachelor of Chair of Materials Science and Materials Technology
Maksim Yu. Murashkin³, PhD (Engineering), senior researcher
Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

*E-mail: medvedev.ae@ugatu.su

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8616-0042>

²ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1879-9389>

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9950-0336>

Received 25.04.2022

Accepted 20.07.2022

Abstract: The development and production of new aluminum-based materials is a critical task of the up-to-date industry. Particularly, new materials are necessary to produce light, strong, and thermally-stable wires and cables for household usage, transport, and power sphere. The paper presents the results of the study of the microstructure and physical and mechanical properties of Al-0.5Fe and Al-1.7Fe alloys (wt. %), produced by continuous casting into an electromagnetic crystallizer (EMC). The authors carried out a comparative analysis of alloys under the study and commercial alloys. During this analysis, the authors produced a wire with the diameter of 3 mm from the primary cast blanks by the cold drawing method (CD). The microstructure analysis showed that as a result of casting into an electromagnetic crystallizer, the particles of metastable modification Al₂Fe phase appear during the crystallization process that have sizes close to the nanometric range. The use of the cold drawing method led to the substructure formation in both alloys and the refinement of intermetallic particles, which ensured the significant hardening of alloy specimens. After cold drawing, the intermetallic particles were grinded and distributed along the boundaries of grains/sub-grains. The ultimate tensile strength of the Al-0.5Fe alloy was 204 MPa, while in the Al-1.7Fe alloy, it reached 295 MPa. The electrical conductivity level of the Al-0.5Fe and Al-1.7Fe alloys wire was 58.4 and 52.0 % IACS, respectively. The study showed that the Al-Fe alloys wire with ferrum concentration of up to 1.7 wt. % demonstrated thermal stability at the level of thermally-stable Al-Zr and Al-REM conductive alloys.

Keywords: Al-Fe alloys; casting into an electromagnetic crystallizer; cold drawing; intermetallic particles; mechanical properties; electrical conductivity; thermal stability.

Acknowledgments: The work was supported by the Russian Science Foundation, grant number 20-79-10133. The research part of the work was carried out on the equipment of the Core Facility Centre “Nanotech” of FSBEI HE “USATU”. The authors express their gratitude to Professor V.N. Timofeev (Siberian Federal University) for providing the research material.

For citation: Medvedev A.E., Zhukova O.O., Fedotova D.D., Murashkin M.Yu. The mechanical properties, electrical conductivity, and thermal stability of a wire made of Al-Fe alloys produced by casting into an electromagnetic crystallizer. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 96–105. DOI: [10.18323/2782-4039-2022-3-1-96-105](https://doi.org/10.18323/2782-4039-2022-3-1-96-105).

О совместимости хирургических имплантатов из биорезорбируемых магниевых сплавов с медицинскими изделиями из титановых сплавов

© 2022

Мягких Павел Николаевич^{*1}, младший научный сотрудник НИИ прогрессивных технологий

Мерсон Евгений Дмитриевич², кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник НИИ прогрессивных технологий

Полуянов Виталий Александрович³, кандидат технических наук,
младший научный сотрудник НИИ прогрессивных технологий

Мерсон Дмитрий Львович⁴, доктор физико-математических наук, профессор,
директор НИИ прогрессивных технологий

Бегун Марина Эдуардовна, студент, техник НИИ прогрессивных технологий

Тольяттинский государственный университет, Тольятти (Россия)

*E-mail: feanorhao@gmail.com

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7530-9518>

²ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7063-088X>

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0570-2584>

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5006-4115>

Поступила в редакцию 01.08.2022

Принята к публикации 01.09.2022

Аннотация: Саморастворяющиеся имплантаты из магниевых сплавов, в отличие от традиционных имплантатов из титановых сплавов и нержавеющей стали, обладают способностью полностью растворяться в теле человека, что позволяет обойтись без повторной операции по их извлечению. Вопрос о возможности использования магниевых имплантатов совместно с изделиями из титановых сплавов на данный момент остается в недостаточной мере изученным. В то же время широко известно, что элементы с более положительным электродным потенциалом, чем у магния, такие как титан и железо, пагубно влияют на коррозию магниевых сплавов, поскольку за счет гальванического эффекта растворение магния происходит существенно быстрее. Целью работы было установить, какое влияние на скорость коррозии образца из магниевого сплава ZX10 с ультрамелкозернистой структурой оказывает расстояние до титанового имплантата. Поскольку речь идет о медицинских приложениях, коррозионные испытания проводились в условиях, имитирующих условия внутри человеческого тела: циркуляция коррозионной среды и поддержание температуры 37 ± 1 °C. В качестве коррозионной среды использовался физиологический раствор. Во время коррозионных испытаний титановый имплантат располагали в 3, 6 и 12 см от образца из магниевого сплава. Дополнительно были проведены испытания образцов контрольной группы без титанового имплантата. Согласно полученным данным при расстоянии между титаном и магнием в 3 см гальванический эффект ярко проявляется: увеличивается скорость коррозии и размер коррозионных повреждений, однако на расстоянии в 6 см титановый имплантат уже не оказывает видимого влияния на коррозию образца.

Ключевые слова: магниевые сплавы; ZX10; биорезорбируемые материалы; коррозия; медицинские имплантаты.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90073, а также при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 20-19-00585.

Для цитирования: Мягких П.Н., Мерсон Е.Д., Полуянов В.А., Мерсон Д.Л., Бегун М.Э. О совместимости хирургических имплантатов из биорезорбируемых магниевых сплавов с медицинскими изделиями из титановых сплавов // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 106–114. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-106-114.

ВВЕДЕНИЕ

Идея создать легкий, прочный и при этом способный растворяться в теле человека хирургический имплантат зародилась еще в XX веке. Первым материалом для подобных изделий стали биорезорбируемые полимеры, такие как полилактид (PLA), полигидроксibuтират (PHB), полиортоэстер, полигликоль (PGA) и многие другие [1]. Биорезорбируемые полимеры выделяются доступностью и низкой стоимостью, например, полилактид является продуктом переработки сельскохозяйственных отходов растительного происхождения. Следует отметить, что многие из них превосходно обрабатываются: термопластичные полимеры (термопласты) широко известны способностью к горячей формовке,

а многие из них, например полилактид, хорошо зарекомендовали себя в качестве материалов для 3D-печати методом горячего плавления (fused deposition modeling, FDM). К недостаткам биорезорбируемых полимеров следует отнести их невысокие механические характеристики и рентгенопрозрачность, которая затрудняет отслеживание процесса растворения имплантата и оценку его текущего состояния. На данный момент предпринимаются попытки решения этих проблем путем создания полимерных композитов с добавлением частиц биорезорбируемых металлов, например магния [2]. Некоторые виды керамики также обладают способностью растворяться в теле человека, не нанося вреда его здоровью. Традиционно к таким материалам относятся соединения кальция (гидроксиапатит, ортофосфат,

апатит-волластонит) [3; 4]. Пористая керамика имеет хорошую интеграцию с образующейся костной тканью, однако механические свойства керамических изделий, в частности пластичность, довольно низкие: отмечаются их высокая склонность к хрупкому разрушению, низкие показатели упругости и ударной вязкости [5]. Среди металлических материалов биорезорбируемых сплавов на основе цинка, железа и магния. Биорезорбируемые сплавы на основе цинка имеют хорошие показатели скорости коррозии (менее 0,2 мм/год), однако довольно низкие прочностные характеристики: даже после специальной термомеханической обработки их предел прочности редко превышает 200 МПа [6]. Сплавы на основе железа, напротив, как правило, имеют высокую прочность, но неудовлетворительные показатели скорости коррозии: в живом организме изделия из железа и его сплавов будут растворяться несколько лет. На данный момент эту проблему пытаются решить путем добавления в сплавы Fe–Mn небольшого количества палладия [7].

Сплавы на основе магния имеют довольно высокие механические характеристики: для сплавов с LPSO-структурой вполне достижимым является показатель в 600 МПа [8]. Их модуль Юнга близок к модулю Юнга костной ткани, кроме того, путем термомеханической обработки удается добиться уменьшения скорости коррозии [9]. Одной из проблем использования магниевых сплавов является то, что магний имеет электрохимический потенциал $-2,37$ В. Это означает, что любой элемент с более положительным потенциалом будет провоцировать ускоренную электрохимическую коррозию магния. Как правило, наиболее негативное влияние вносят такие элементы, как Fe, Ni, Ti и Cu. Даже тысячные доли процента этих металлов способны существенно повысить скорость коррозии магниевых сплавов, кроме того, они плохо растворяются в магниевой матрице, поэтому находятся в материале в виде включений, которые в коррозионной среде становятся очагами локализованной питтинговой коррозии.

Говоря об опасности интенсивного растворения магния под действием электрохимического (гальванического) эффекта, вносимого элементами с более положительным потенциалом, необходимо предусматривать возможность контакта медицинских изделий из магния и традиционно применяющегося в хирургии титана. В некоторых случаях это может дать положительный эффект, например, в работе [10] была использована инновационная схема фиксации перелома: титановый имплантат крепился к кости титановыми винтами, а также дополнительно в месте перелома винтами из магния. Авторы отмечают, что магниевый винт не только обеспечил достаточную фиксацию перелома, но и стимулировал более интенсивное заживление за счет увеличения костной мозоли и ускорения ее минерализации. Однако скорость растворения магниевых винтов не оценивалась. На практике может возникнуть ситуация, когда потребуется установить магниевый имплантат на некотором расстоянии от уже установленного титанового. В таком случае у хирурга должно быть четкое понимание возможности возникновения гальванопары между титаном и магнием и, соответственно, риска преждевременного выхода из строя магниевых имплантатов ввиду его ускоренного растворения.

Цель работы – изучение влияния присутствия в электролите титанового имплантата на процесс коррозии магниевых биорезорбируемых сплавов и определение безопасного расстояния, на котором негативный эффект не будет проявляться.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для исследования был выбран сплав ZX10 с ультрамелкозернистой структурой, полученной методом всесторонней изотермическойковки в интервале температур 325–425 °С и последующей осадки (ВИК+О). Термомеханическая обработка материала выполнялась в ИПСМ РАН (г. Уфа). Химический состав определялся посредством оптико-эмиссионного спектрометра Thermo Fisher Scientific ARL 4460 OES.

Образцы для испытаний были вырезаны при помощи электроискрового станка с ЧПУ Sodick AG400L LN2W, имели плоскую прямоугольную форму и размеры 12×7×2 мм, в верхней части образцов на сверлильном станке были просверлены отверстия Ø 1 мм, которые служили для подвешивания в коррозионной среде. Образцы шлифовались на сухую наждачной бумагой с зернистостью 2500, промывались в этаноле в ультразвуковой ванне, сушились потоком воздуха и взвешивались на лабораторных весах с точностью 0,0001 г.

Коррозионные испытания включали в себя выдержку в течение 7 дней в водном растворе 0,9 % NaCl по аналогии с [11; 12] в коррозионной ячейке емкостью 5 л (рис. 1). На расстоянии 3, 6 и 12 см от образца в вертикальном положении размещался титановый костный имплантат фирмы Stryker. Дополнительно были проведены испытания без титанового имплантата (контрольная группа). Во время испытаний обеспечивалась температура 37 ± 1 °С, коррозионная среда перемешивалась за счет перистальтического насоса. Скорость коррозии оценивалась по выходу водорода, образующегося в ходе растворения магния, по аналогии с работами [13; 14]. Уровень pH измерялся трижды в день при помощи pH-метра Mettler Toledo Delta 320. Видеомониторинг осуществлялся при помощи камеры с разрешением 38 МП, частота съемки – раз в 60 с. После извлечения образца из коррозионной среды с его поверхности удалялись продукты коррозии в водном растворе 20% CrO₃+1% AgNO₃ по ГОСТ Р 9.907. Далее образец промывался в этаноле в ультразвуковой ванне, сушился потоком холодного воздуха и повторно взвешивался с целью определить скорость коррозии по разнице массы до и после испытаний. Исследование поверхности образца, включая прецизионную оценку глубины повреждений, выполнялось на конфокальном лазерном сканирующем микроскопе (КЛСМ) Olympus LEXT OLS 4000.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В таблице 1 приведен общий химический состав сплава ZX10.

На рис. 2 показана микроструктура сплава ZX10. Средний размер зерна составил 4 мкм. Зерна равноосные, явно выраженная текстура отсутствует.

На рис. 3 показан график изменения уровня pH в среде. Принципиального отличия поведения pH раствора при испытании образцов, подвешенных на разных

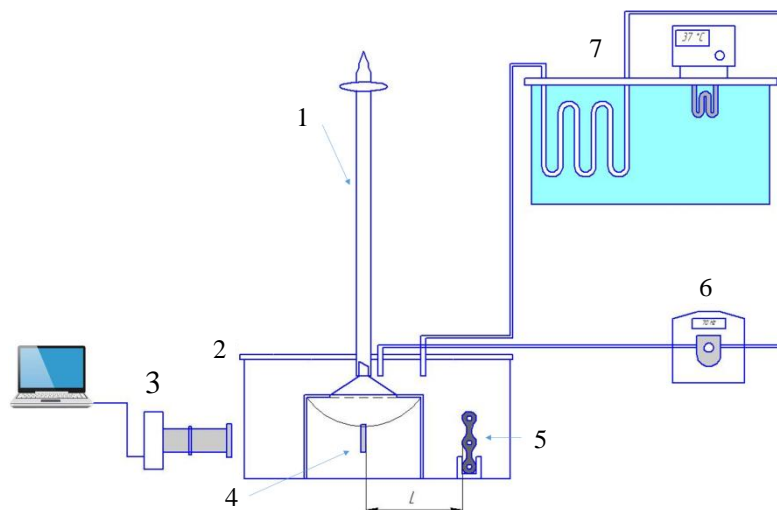


Рис. 1. Схема испытательной установки:
 1 – бюретка; 2 – коррозионная ячейка; 3 – камера для видеомониторинга; 4 – образец;
 5 – титановый имплантат; 6 – перистальтический насос; 7 – термостат

Fig. 1. Schematics of an experimental setup:
 1 – burette; 2 – corrosion cell; 3 – video-monitoring camera; 4 – sample;
 5 – titanium implant; 6 – peristaltic pump; 7 – thermostat

Таблица 1. Химический состав сплава ZX10, вес. %
Table 1. Chemical composition of the ZX10 alloy, % wt.

Mg	Zn	Zr	Ca	Fe	Mn	Si	Al	Cu
Основа	0,844	0,032	0,167	0,004	0,007	0,008	0,014	0,001

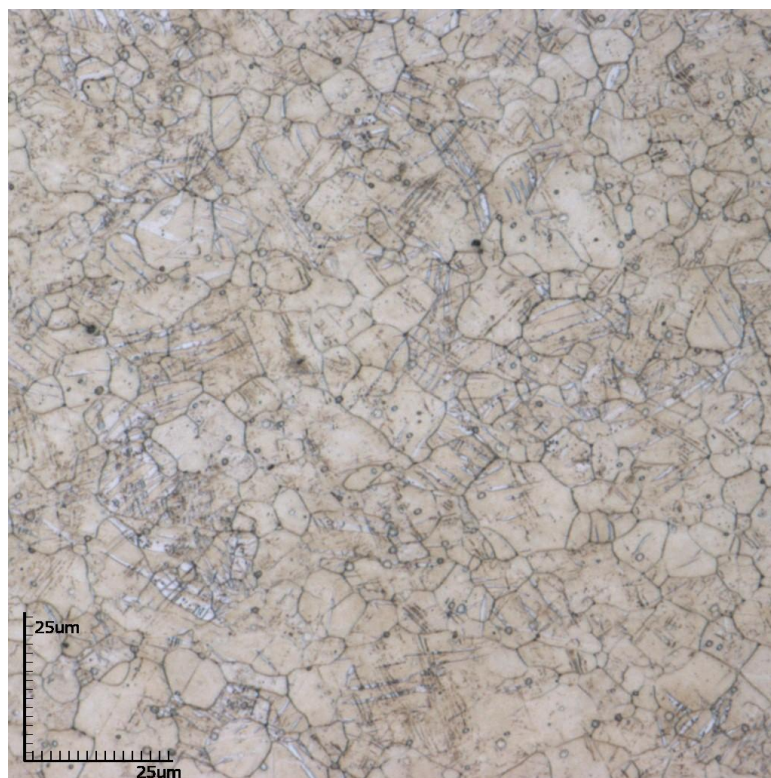


Рис. 2. Структура сплава ZX10 (оптическая микроскопия)
Fig. 2. The ZX10 alloy structure (optical microscopy)

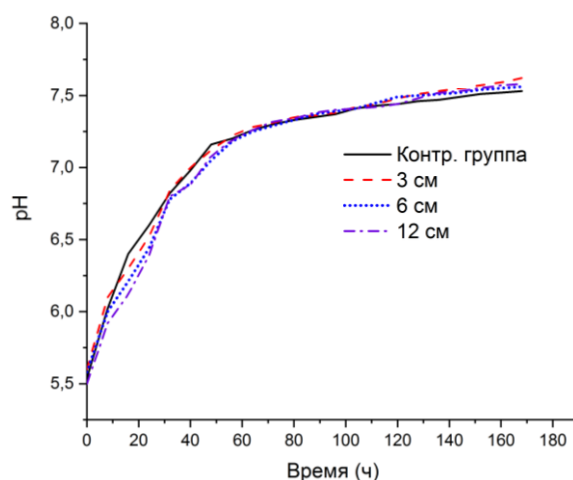


Рис. 3. Изменение уровня pH коррозионной среды
Fig. 3. Evolution of the corrosive media pH level

расстояниях от титанового имплантата, не выявлено: во всех случаях график устремляется вверх и на третий день выходит на плато. Прямой корреляции между уровнем pH и скоростью коррозии в данной работе не было обнаружено.

Кривые выхода водорода приведены на рис. 4. Для образцов, расположенных в 6 и 12 см от титанового имплантата, а также для образцов контрольной группы характерна кривая с резким скачком в первые 6–10 ч испытаний, затем плато в течение 20–30 ч и загиб вверх, означающий увеличение скорости коррозии. Для образца, подвешенного в 3 см от титанового имплантата, график имеет иной вид: плато после скачка не следует, кривая немного уменьшает угол наклона, и затем до конца эксперимента изменения отсутствуют.

На рис. 5 приведены значения скорости коррозии, рассчитанные двумя методами: по выходу водорода и по убыли массы (гравиметрический метод). Отчетливо видно, что скорость коррозии образцов, подвешен-

ных в 3 см от титанового имплантата, существенно выше, чем всех остальных. Скорость коррозии остальных образцов с учетом доверительных интервалов можно считать одинаковой.

На рис. 6 приведены результаты видеомониторинга образцов. Принципиальных различий между образцами в стадийности образования коррозионных повреждений не обнаружено. На образцах визуально заметны 2 вида повреждений: многочисленные язвы небольшого размера и локализованные крупные очаги коррозии. Также отчетливо видно, что вокруг язв образца, расположенного в 3 см от имплантата, продуктов коррозии существенно больше.

На рис. 7 представлены карты высот, согласно которым глубокие коррозионные повреждения получили все образцы, однако у образца, расположенного в 3 см от титанового имплантата, они значительно крупнее: в верхней части присутствует крупная сквозная язва.

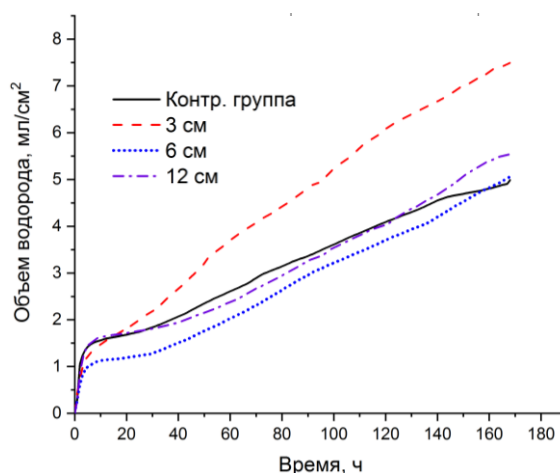


Рис. 4. График выделения водорода
Fig. 4. Hydrogen evolution graph

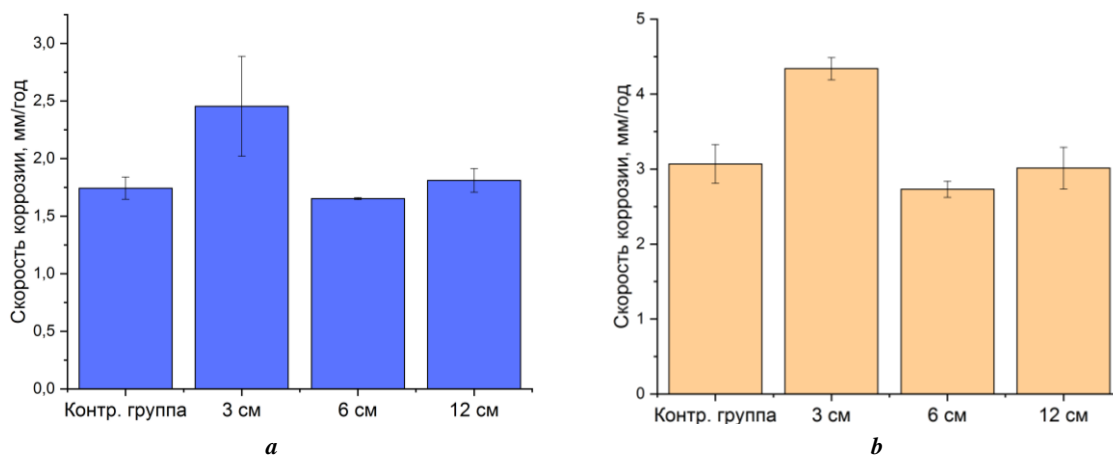


Рис. 5. Скорость коррозии, посчитанная по выходу водорода (a) и по убыли массы (b)
 Fig. 5. Corrosion rate calculated by the hydrogen evolution (a) and weight loss (b) methods

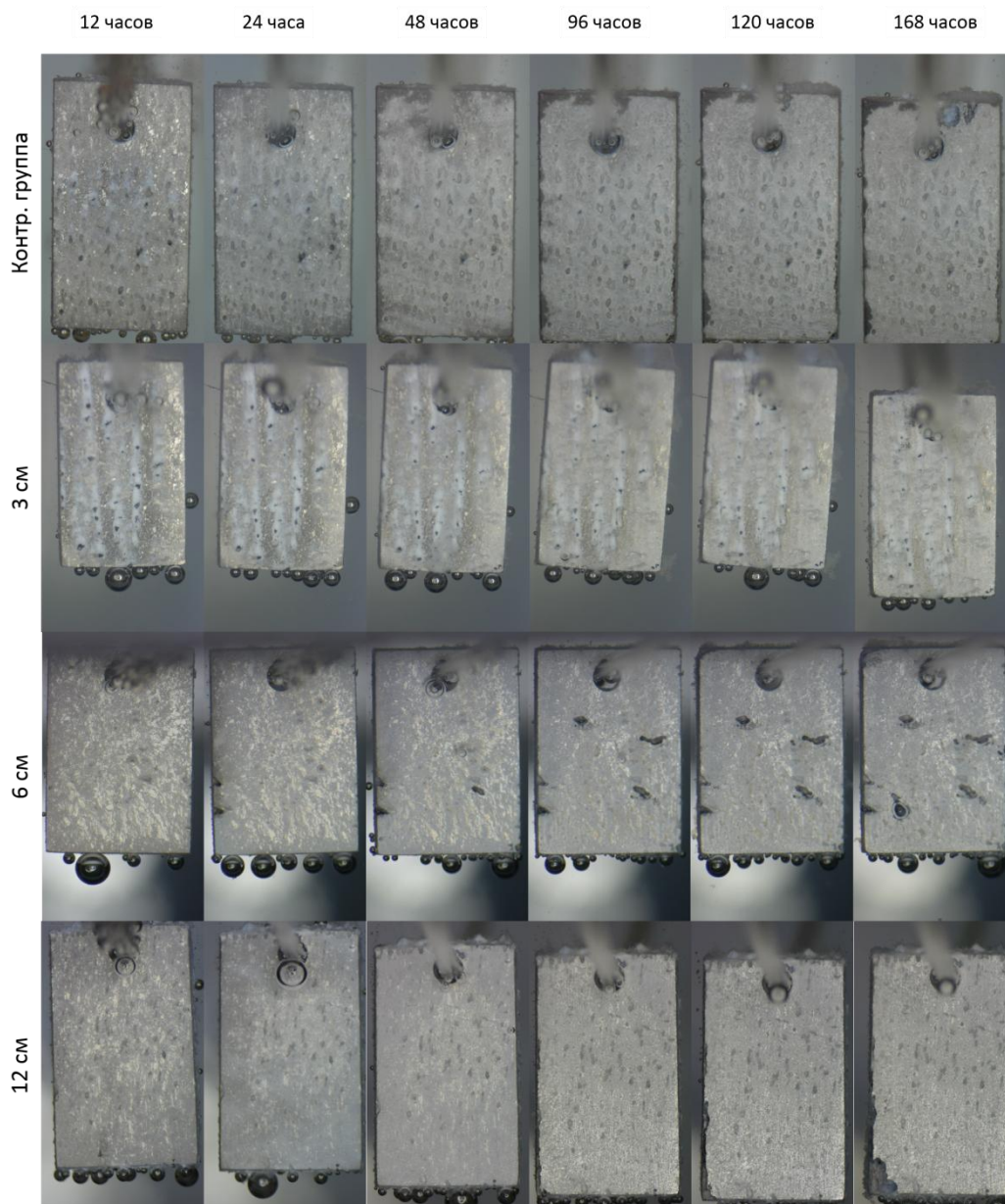


Рис. 6. Результаты видеомониторинга
 Fig. 6. Video-monitoring results

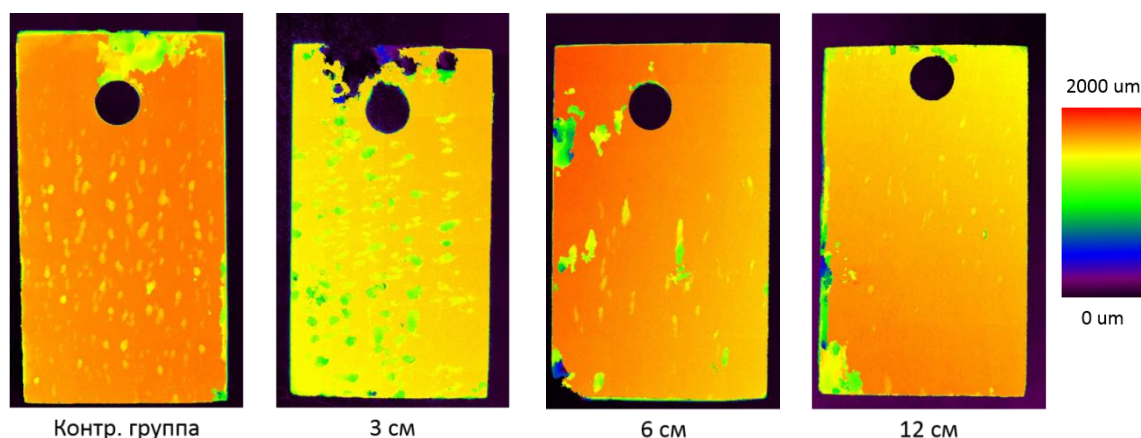


Рис. 7. Карты высот поверхности образцов
Fig. 7. Height maps of the samples' surface

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные кривые выхода водорода, а также количественные показатели скорости коррозии позволяют заключить, что влияние титанового имплантата на процесс коррозии сплава ZX10 заметно только при расположении их в 3 см относительно друг друга. Скорость коррозии при этом выше в 1,5 раза по сравнению с контрольной группой, а кривая выхода водорода меняет свой вид: характерное для данного материала плато в период 6–30 ч испытаний отсутствует, что говорит о незавершенном процессе пассивации. В остальных случаях влияние титана как на кинетику коррозионных процессов, так и на количественные показатели скорости коррозии не наблюдается. При этом довольно интересным является отсутствие какой-либо корреляции между кривыми выхода водорода и графиками изменения pH, поскольку во многих исследованиях он представляется как косвенный метод отслеживания кинетики процессов коррозии [15–17].

При сопоставлении результатов видеомониторинга и КЛСМ видно, что на поверхности образцов развивается 2 типа коррозионных повреждений. Первый – многочисленные небольшие язвы, глубина которых составляет 100–150 мкм (200–250 мкм для образца, расположенного в 3 см от титанового имплантата). Второй тип повреждений – крупные язвы глубиной более 1 мм (сквозные в случае образца, расположенного в 3 см от титанового имплантата). Объяснить, чем обусловлен каждый тип повреждений, в рамках данной работы не представляется возможным. Однако с большой вероятностью можно ожидать, что небольшие язвы появляются на участках с преобладанием определенной кристаллографической ориентации, поскольку, как ранее было установлено, коррозионная стойкость в значительной мере зависит от ориентации зерен [18]. Второй тип повреждений, возможно, обусловлен неравномерностью химического состава, поскольку частицы вторичных фаз могут провоцировать локализованную коррозию за счет электрохимического эффекта [19; 20]. На карте высот видно, что самому сильному коррозионному воздействию подвергся образец, расположенный в 3 см от титанового имплантата, о чем свидетельствует обширная сквозная язва в его верхней части. При этом повре-

ждения первого типа у данного образца не намного глубже, чем у контрольной группы. Это может говорить о том, что гальванический эффект усиливает развитие в первую очередь повреждений второго типа.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Скорости коррозии образцов сплава ZX10, расположенных в 6 и более см от титанового имплантата, не отличаются от скорости коррозии образцов контрольной группы. Это указывает на то, что электрохимический эффект между магнием и титаном на этом расстоянии в данном растворе отсутствует или незначителен.

2. Кинетика процесса коррозии образцов, расположенных в 6 и более см от титанового имплантата, также схожа с кинетикой коррозии образцов контрольной группы: на кривой выхода водорода ярко выражен скачок в первые 6–10 ч эксперимента, затем плато в течение 20–30 ч и загиб кривой вверх.

3. Скорость коррозии образцов, расположенных в 3 см от титанового имплантата, в 1,5 раза выше, чем у остальных образцов, что явно указывает на значительное влияние титана на коррозию магниевого сплава ZX10. Кроме того, кривая выхода водорода для данных образцов имеет характерные особенности: после кратковременного скачка процесс коррозии протекает с постоянной скоростью, а плато как у других образцов не наблюдается.

4. Все образцы продемонстрировали склонность к локализованной коррозии, однако у образца, подвешенного в 3 см от титанового имплантата, повреждения значительно обширнее и носят сквозной характер.

5. Полученные результаты свидетельствуют о том, что установка имплантата из магниевого сплава в организме человека ближе, чем в 6 см, к уже установленному титановому имплантату несет значительные риски преждевременного выхода изделия из строя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Prakasam M., Locs J., Salma-Ancane K., Loca D., Largeteau A., Berzina-Cimdina L. Biodegradable materials and metallic implants-A review // Journal of Func-

- tional Biomaterials. 2017. Vol. 8. № 4. Article number 44. DOI: [10.3390/jfb8040044](https://doi.org/10.3390/jfb8040044).
2. Antoniac I., Popescu D., Zapciu A., Antoniac A., Miculescu F., Moldovan H. Magnesium filled polylactic acid (PLA) material for filament based 3D printing // *Materials*. 2019. Vol. 12. № 5. Article number 719. DOI: [10.3390/ma12050719](https://doi.org/10.3390/ma12050719).
 3. Knaack D., Goad M.E.P., Aiolo M., Rey C., Tofighi A., Chakravarthy P., Lee D.D. Resorbable calcium phosphate bone substitute // *Journal of Biomedical Materials Research*. 1998. Vol. 43. № 4. P. 399–409. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-4636\(199824\)43:4<399::AID-JBM7>3.0.CO;2-J](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4636(199824)43:4<399::AID-JBM7>3.0.CO;2-J).
 4. Teramoto H., Kawai A., Sugihara S., Yoshida A., Inoue H. Resorption of Apatite-wollastonite containing glass-ceramic and β -tricalcium phosphate in vivo // *Acta Medica Okayama*. 2005. Vol. 59. № 5. P. 201–207. DOI: [10.18926/AMO/31974](https://doi.org/10.18926/AMO/31974).
 5. Poinern G.E.J., Brundavanam S., Fawcett D. Biomedical Magnesium Alloys: A Review of Material Properties, Surface Modifications and Potential as a Biodegradable Orthopaedic Implant // *American Journal of Biomedical Engineering*. 2021. Vol. 2. № 6. P. 218–240. DOI: [10.5923/j.ajbe.20120206.02](https://doi.org/10.5923/j.ajbe.20120206.02).
 6. Levy G.K., Goldman J., Aghion E. The Prospects of Zinc as a Structural Material for Biodegradable Implants—A Review Paper // *Metals*. 2017. Vol. 7. № 10. Article number 402. DOI: [10.3390/met7100402](https://doi.org/10.3390/met7100402).
 7. Schinhammer M., Hänni A.C., Löffler J.F., Uggowitzer P.J. Design strategy for biodegradable Fe-based alloys for medical applications // *Acta Biomaterialia*. 2010. Vol. 6. № 5. P. 1705–1713. DOI: [10.1016/j.actbio.2009.07.039](https://doi.org/10.1016/j.actbio.2009.07.039).
 8. Merson D., Brilevsky A., Myagkikh P., Tarkova A., Prokhorikhin A., Kretov E., Frolova T., Vinogradov A. The functional properties of Mg-Zn-X biodegradable magnesium alloys // *Materials*. 2020. Vol. 13. № 3. Article number 544. DOI: [10.3390/ma13030544](https://doi.org/10.3390/ma13030544).
 9. Merson D.L., Brilevsky A.I., Myagkikh P.N., Markushchev M.V., Vinogradov A. Effect of deformation processing of the dilute Mg-1Zn-0.2Ca alloy on the mechanical properties and corrosion rate in a simulated body fluid // *Letters on Materials*. 2020. Vol. 10. № 2. P. 217–222. DOI: [10.22226/2410-3535-2020-2-217-222](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2020-2-217-222).
 10. Tian L., Sheng Y., Huang L., Chow D.H.K., Chau W.H., Tang N., Ngai T., Wu C., Lu J., Qin L. An innovative Mg/Ti hybrid fixation system developed for fracture fixation and healing enhancement at load-bearing skeletal site // *Biomaterials*. 2018. Vol. 180. P. 173–183. DOI: [10.1016/j.biomaterials.2018.07.018](https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2018.07.018).
 11. Мягких П.Н., Мерсон Е.Д., Полуянов В.А., Мерсон Д.Л. In-situ исследование процесса коррозии магниевых биорезорбируемых сплавов // *Вектор науки Тольяттинского государственного университета*. 2021. № 2. С. 18–25. DOI: [10.18323/2073-5073-2021-2-18-25](https://doi.org/10.18323/2073-5073-2021-2-18-25).
 12. Мягких П.Н., Мерсон Е.Д., Полуянов В.А., Мерсон Д.Л. In-situ исследование кинетики и эволюции коррозионного разрушения чистого магния с разным размером зерна // *Materials. Technologies. Design*. 2022. Т. 4. № 1. С. 39–47. DOI: [10.54708/26587572_2022_41739](https://doi.org/10.54708/26587572_2022_41739).
 13. Song G. Control of biodegradation of biocompatible magnesium alloys // *Corrosion Science*. 2007. Vol. 49. № 4. P. 1696–1701. DOI: [10.1016/j.corsci.2007.01.001](https://doi.org/10.1016/j.corsci.2007.01.001).
 14. Xin Y., Liu C., Zhang X., Tang G., Tian X., Chu P.K. Corrosion behavior of biomedical AZ91 magnesium alloy in simulated body fluids // *Journal of Materials Research*. 2007. Vol. 22. № 7. P. 2004–2011. DOI: [10.1557/jmr.2007.0233](https://doi.org/10.1557/jmr.2007.0233).
 15. Li K.K., Wang B., Yan B., Lu W. Preparing Ca-P coating on biodegradable magnesium alloy by hydrothermal method: In vitro degradation behavior // *Chinese Science Bulletin*. 2012. Vol. 57. № 18. P. 2319–2322. DOI: [10.1007/s11434-012-5067-5](https://doi.org/10.1007/s11434-012-5067-5).
 16. Li L.Y., Liu B., Zeng R.C., Li S.Q., Zhang F., Zou Y.H., Jiang H.G., Chen X.B., Guan S.K., Liu Q.Y. In vitro corrosion of magnesium alloy AZ31 - a synergetic influence of glucose and Tris // *Frontiers of Materials Science*. 2018. Vol. 12. № 2. P. 184–197. DOI: [10.1007/s11706-018-0424-1](https://doi.org/10.1007/s11706-018-0424-1).
 17. Makkar P., Sarkar S.K., Padalhin A.R., Moon B.G., Lee Y.S., Lee B.T. In vitro and in vivo assessment of biomedical Mg–Ca alloys for bone implant applications // *Journal of Applied Biomaterials and Functional Materials*. 2018. Vol. 16. № 3. P. 126–136. DOI: [10.1177/2280800017750359](https://doi.org/10.1177/2280800017750359).
 18. Liu M., Qiu D., Zhao M.C., Song G., Atrens A. The effect of crystallographic orientation on the active corrosion of pure magnesium // *Scripta Materialia*. 2008. Vol. 58. № 5. P. 421–424. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2007.10.027](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2007.10.027).
 19. Zhang X., Ba Z., Wang Q., Wu Y., Wang Z., Wang Q. Uniform corrosion behavior of GZ51K alloy with long period stacking ordered structure for biomedical application // *Corrosion Science*. 2014. Vol. 88. P. 1–5. DOI: [10.1016/j.corsci.2014.07.004](https://doi.org/10.1016/j.corsci.2014.07.004).
 20. Pogorielov M., Husak E., Solodivnik A., Zhdanov S. Magnesium-based biodegradable alloys: Degradation, application, and alloying elements // *Interventional Medicine and Applied Science*. 2017. Vol. 9. № 1. P. 27–38. DOI: [10.1556/1646.9.2017.1.04](https://doi.org/10.1556/1646.9.2017.1.04).

REFERENCES

1. Prakasam M., Locs J., Salma-Ancane K., Loca D., Largeteau A., Berzina-Cimdina L. Biodegradable materials and metallic implants—A review. *Journal of Functional Biomaterials*, 2017, vol. 8, no. 4, article number 44. DOI: [10.3390/jfb8040044](https://doi.org/10.3390/jfb8040044).
2. Antoniac I., Popescu D., Zapciu A., Antoniac A., Miculescu F., Moldovan H. Magnesium filled polylactic acid (PLA) material for filament based 3D printing. *Materials*, 2019, vol. 12, no. 5, article number 719. DOI: [10.3390/ma12050719](https://doi.org/10.3390/ma12050719).
3. Knaack D., Goad M.E.P., Aiolo M., Rey C., Tofighi A., Chakravarthy P., Lee D.D. Resorbable calcium phosphate bone substitute. *Journal of Biomedical Materials Research*, 1998, vol. 43, no. 4, pp. 399–409. DOI: [10.1002/\(SICI\)1097-4636\(199824\)43:4<399::AID-JBM7>3.0.CO;2-J](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-4636(199824)43:4<399::AID-JBM7>3.0.CO;2-J).
4. Teramoto H., Kawai A., Sugihara S., Yoshida A., Inoue H. Resorption of Apatite-wollastonite containing glass-ceramic and β -tricalcium phosphate in vivo. *Acta*

- Medica Okayama*, 2005, vol. 59, no. 5, pp. 201–207. DOI: [10.18926/AMO/31974](https://doi.org/10.18926/AMO/31974).
5. Poinern G.E.J., Brundavanam S., Fawcett D. Biomedical Magnesium Alloys: A Review of Material Properties, Surface Modifications and Potential as a Biodegradable Orthopaedic Implant. *American Journal of Biomedical Engineering*, 2021, vol. 2, no. 6, pp. 218–240. DOI: [10.5923/j.ajbe.20120206.02](https://doi.org/10.5923/j.ajbe.20120206.02).
 6. Levy G.K., Goldman J., Aghion E. The Prospects of Zinc as a Structural Material for Biodegradable Implants—A Review Paper. *Metals*, 2017, vol. 7, no. 10, article number 402. DOI: [10.3390/met7100402](https://doi.org/10.3390/met7100402).
 7. Schinhammer M., Hänzli A.C., Löffler J.F., Uggowitz P.J. Design strategy for biodegradable Fe-based alloys for medical applications. *Acta Biomaterialia*, 2010, vol. 6, no. 5, pp. 1705–1713. DOI: [10.1016/j.actbio.2009.07.039](https://doi.org/10.1016/j.actbio.2009.07.039).
 8. Merson D., Brilevsky A., Myagkikh P., Tarkova A., Prokhorikhin A., Kretov E., Frolova T., Vinogradov A. The functional properties of Mg-Zn-X biodegradable magnesium alloys. *Materials*, 2020, vol. 13, no. 3, article number 544. DOI: [10.3390/ma13030544](https://doi.org/10.3390/ma13030544).
 9. Merson D.L., Brilevsky A.I., Myagkikh P.N., Markushev M.V., Vinogradov A. Effect of deformation processing of the dilute Mg-1Zn-0.2Ca alloy on the mechanical properties and corrosion rate in a simulated body fluid. *Letters on Materials*, 2020, vol. 10, no. 2, pp. 217–222. DOI: [10.22226/2410-3535-2020-2-217-222](https://doi.org/10.22226/2410-3535-2020-2-217-222).
 10. Tian L., Sheng Y., Huang L., Chow D.H.K., Chau W.H., Tang N., Ngai T., Wu C., Lu J., Qin L. An innovative Mg/Ti hybrid fixation system developed for fracture fixation and healing enhancement at load-bearing skeletal site. *Biomaterials*, 2018, vol. 180, pp. 173–183. DOI: [10.1016/j.biomaterials.2018.07.018](https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2018.07.018).
 11. Myagkikh P.N., Merson E.D., Poluyanov V.A., Merson D.L. In-situ study of corrosion process of biodegradable magnesium alloys. *Vektor nauki Tolyatinskogo gosudarstvennogo universiteta*, 2021, no. 2, pp. 18–25. DOI: [10.18323/2073-5073-2021-2-18-25](https://doi.org/10.18323/2073-5073-2021-2-18-25).
 12. Myagkikh P.N., Merson E.D., Poluyanov V.A., Merson D.L. Kinetics and evolution of corrosion failure of pure magnesium with various grain size: in-situ study. *Materials. Technologies. Design*, 2022, vol. 4, no. 1, pp. 39–47. DOI: [10.54708/26587572_2022_41739](https://doi.org/10.54708/26587572_2022_41739).
 13. Song G. Control of biodegradation of biocompatible magnesium alloys. *Corrosion Science*, 2007, vol. 49, no. 4, pp. 1696–1701. DOI: [10.1016/j.corsci.2007.01.001](https://doi.org/10.1016/j.corsci.2007.01.001).
 14. Xin Y., Liu C., Zhang X., Tang G., Tian X., Chu P.K. Corrosion behavior of biomedical AZ91 magnesium alloy in simulated body fluids. *Journal of Materials Research*, 2007, vol. 22, no. 7, pp. 2004–2011. DOI: [10.1557/jmr.2007.0233](https://doi.org/10.1557/jmr.2007.0233).
 15. Li K.K., Wang B., Yan B., Lu W. Preparing Ca-P coating on biodegradable magnesium alloy by hydrothermal method: In vitro degradation behavior. *Chinese Science Bulletin*, 2012, vol. 57, no. 18, pp. 2319–2322. DOI: [10.1007/s11434-012-5067-5](https://doi.org/10.1007/s11434-012-5067-5).
 16. Li L.Y., Liu B., Zeng R.C., Li S.Q., Zhang F., Zou Y.H., Jiang H.G., Chen X.B., Guan S.K., Liu Q.Y. In vitro corrosion of magnesium alloy AZ31 - a synergistic influence of glucose and Tris. *Frontiers of Materials Science*, 2018, vol. 12, no. 2, pp. 184–197. DOI: [10.1007/s11706-018-0424-1](https://doi.org/10.1007/s11706-018-0424-1).
 17. Makkar P., Sarkar S.K., Padalhin A.R., Moon B.G., Lee Y.S., Lee B.T. In vitro and in vivo assessment of biomedical Mg–Ca alloys for bone implant applications. *Journal of Applied Biomaterials and Functional Materials*, 2018, vol. 16, no. 3, pp. 126–136. DOI: [10.1177/2280800017750359](https://doi.org/10.1177/2280800017750359).
 18. Liu M., Qiu D., Zhao M.C., Song G., Atrens A. The effect of crystallographic orientation on the active corrosion of pure magnesium. *Scripta Materialia*, 2008, vol. 58, no. 5, pp. 421–424. DOI: [10.1016/j.scriptamat.2007.10.027](https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2007.10.027).
 19. Zhang X., Ba Z., Wang Q., Wu Y., Wang Z., Wang Q. Uniform corrosion behavior of GZ51K alloy with long period stacking ordered structure for biomedical application. *Corrosion Science*, 2014, vol. 88, pp. 1–5. DOI: [10.1016/j.corsci.2014.07.004](https://doi.org/10.1016/j.corsci.2014.07.004).
 20. Pogorielov M., Husak E., Solodivnik A., Zhdanov S. Magnesium-based biodegradable alloys: Degradation, application, and alloying elements. *Interventional Medicine and Applied Science*, 2017, vol. 9, no. 1, pp. 27–38. DOI: [10.1556/1646.9.2017.1.04](https://doi.org/10.1556/1646.9.2017.1.04).

On the compatibility of surgical implants of bioresorbable magnesium alloys with medical devices of titanium alloys

© 2022

Pavel N. Myagkikh^{*1}, junior researcher of the Research Institute of Advanced Technologies

Evgeny D. Merson², PhD (Physics and Mathematics),

senior researcher of the Research Institute of Advanced Technologies

Vitaly A. Poluyanov³, PhD (Engineering), junior researcher of the Research Institute of Advanced Technologies

Dmitry L. Merson⁴, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,

Director of the Research Institute of Advanced Technologies

Marina E. Begun, student, a technician of the Research Institute of Advanced Technologies

Togliatti State University, Togliatti (Russia)

*E-mail: feanorhao@gmail.com

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7530-9518>

²ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7063-088X>

³ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0570-2584>

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5006-4115>

Received 01.08.2022

Accepted 01.09.2022

Abstract: Self-resorbable implants made of magnesium alloys, unlike the traditional implants made of titanium alloys and stainless steels, have the ability to completely dissolve in the human body, which makes it possible to eliminate the need for a recurrent operation to extract them. The issue of the possibility of using magnesium implants in the combination with products made of titanium alloys remains insufficiently studied at the moment. At the same time, it is widely known that the elements such as titanium and iron, with a potential more positive than magnesium, have a disastrous influence on the corrosion of magnesium alloys, since magnesium dissolves much faster due to the galvanic effect. This work is aimed to determine how the distance to a titanium implant affects the corrosion rate of a ZX10 magnesium alloy sample with an ultra-fine grain structure. As it is an issue of medical application, the authors carried out the corrosion tests within the conditions simulating the human body conditions: the corrosion medium circulation and keeping temperature within 37 ± 1 °C. The authors used physiological solution as a corrosion medium. During corrosion testing, a titanium implant was placed in three, six, and twelve centimeters from the magnesium alloy sample; and the control tests were also carried out without a titanium implant. According to the obtained data, at a distance of 3 cm, the galvanic effect between titanium and magnesium manifests itself strongly, increasing the corrosion rate and the size of corrosion damage, but at a distance of 6 cm, the titanium implant does not have a visible effect on the corrosion of a sample.

Keywords: magnesium alloys; ZX10; bioresorbable materials; corrosion; medical implants.

Acknowledgments: The study was financially supported by the Russian Foundation for Basic Research within the scientific project No. 20-38-90073 and by the Russian Science Foundation, project No. 20-19-00585.

For citation: Myagkikh P.N., Merson E.D., Poluyanov V.A., Merson D.L., Begun M.E. On the compatibility of surgical implants of bioresorbable magnesium alloys with medical devices of titanium alloys. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 106–114. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-106-114.

НАШИ АВТОРЫ

Абдуллина Дина Ураловна, магистр кафедры материаловедения и физики металлов.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,

450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.

E-mail: dina.abdullina25@gmail.com

Аксенов Денис Алексеевич, младший научный сотрудник.

Адрес 1: Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук,

450054, Россия, г. Уфа, пр-т Октября, 71.

Адрес 2: Уфимский государственный авиационный технический университет,

450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.

E-mail: aksyonovda@mail.ru

Александров Игорь Васильевич, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры материаловедения и физики металлов.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,

450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.

E-mail: igorvalexandrov@yandex.ru

Астанин Василий Владимирович, младший научный сотрудник кафедры электромеханики.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,

450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.

E-mail: v.astanin@gmail.com

Асфандияров Рашид Наилевич, кандидат технических наук, научный сотрудник, доцент кафедры материаловедения и физики металлов.

Адрес 1: Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук,

450054, Россия, г. Уфа, пр-т Октября, 71.

Адрес 2: Уфимский государственный авиационный технический университет,

450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.

E-mail: a.r.n@list.ru

Атрошенко Валерий Владимирович, доктор технических наук,

заведующий кафедрой современных методов сварки и контроля конструкций.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,

450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.

E-mail: 91250@mail.ru

Бабичева Рита Исмагиловна, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник школы машиностроения и аэрокосмической инженерии.

Адрес: Наньянский технологический университет,

639798, Сингапур, г. Сингапур, пр-т Наньян, 50.

E-mail: ri.babicheva@mail.ru

Бибихов Юрий Владимирович, кандидат физико-математических наук, доцент.

Адрес: Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета

им. М.К. Аммосова в г. Мирном,

678170, Россия, г. Мирный, ул. Тихонова, 5, корп. 1.

E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

Бегун Марина Эдуардовна, студент, техник НИИ прогрессивных технологий.

Адрес: Тольяттинский государственный университет,

445020, Россия, г. Тольятти, ул. Белорусская, 14.

E-mail: feanorhao@gmail.com

Брызгалов Владимир Александрович, магистрант.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,

450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.

E-mail: bryzgalovv2000@gmail.com

Валиев Руслан Зуфарович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры материаловедения и физики металлов.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: valiev.rz@ugatu.su

Галияхметова Лейсан Халиловна, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник.
Адрес: Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001, Россия, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39.
E-mail: lesya813gys@gmail.com

Гундеров Дмитрий Валерьевич, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник института физики молекул и кристаллов, профессор кафедры материаловедения и физики металлов.
Адрес 1: Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, 450054, Россия, г. Уфа, пр-т Октября, 71.
Адрес 2: Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: dimagun@mail.ru

Гундерова Софья Дмитриевна, студент.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: gynderova@mail.ru

Дмитриев Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник.
Адрес: Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, 450054, Россия, г. Уфа, пр-т Октября, 71.
E-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

Еникеев Нариман Айратович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях», профессор кафедры материаловедения и физики металлов.
Адрес 1: Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
Адрес 2: Башкирский государственный университет, 450076, Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.
E-mail: nariman.enikeev@ugatu.su

Жукова Ольга Олеговна, аспирант кафедры материаловедения и технологии материалов.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: olga.zhukova96@mail.ru

Зайнуллина Лилия Ильгизовна, старший преподаватель кафедры материаловедения и физики металлов.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: ZaynullinaLI@yandex.ru

Зиновьев Александр Викторович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник.
Адрес: Бельгийский центр ядерных исследований, 2400, Бельгия, г. Мол, Буретанг, 200.
E-mail: aleksandr.zinovev@sckcen.be

Казаков Арсений Максимович, студент.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: arseny.m.kazakov@gmail.com

Капустин Алексей Владимирович, аспирант кафедры материаловедения и физики металлов.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: kapustin129@yandex.ru

Корзникова Елена Александровна, доктор физико-математических наук, профессор.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: elena.a.korznikova@gmail.com

Лобачев Владислав Сергеевич, инженер научно-технического отдела.

Адрес: ООО «Аттестационный центр СваркаТехСервис»,
450001, Россия, г. Уфа, ул. Пархоменко, 155/1.
E-mail: Vladik1997okt@mail.ru

Логачев Юрий Владимирович, магистрант.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: yuryk33@mail.ru

Медведев Андрей Евгеньевич, кандидат физико-математических наук,
младший научный сотрудник.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: medvedev.ae@ugatu.su

Мерсон Дмитрий Львович, доктор физико-математических наук, профессор,
директор НИИ прогрессивных технологий.

Адрес: Тольяттинский государственный университет,
445020, Россия, г. Тольятти, ул. Белорусская, 14.
E-mail: D.Merson@tltsu.ru

Мерсон Евгений Дмитриевич, кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник НИИ прогрессивных технологий.

Адрес: Тольяттинский государственный университет,
445020, Россия, г. Тольятти, ул. Белорусская, 14.
E-mail: mersoned@gmail.com

Мурашкин Максим Юрьевич, кандидат технических наук,
старший научный сотрудник.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: maksim.murashkin.70@yandex.ru

Мягких Павел Николаевич, младший научный сотрудник НИИ прогрессивных технологий.

Адрес: Тольяттинский государственный университет,
445020, Россия, г. Тольятти, ул. Белорусская, 14.
E-mail: feanorhao@gmail.com

Полуянов Виталий Александрович, кандидат технических наук,
младший научный сотрудник НИИ прогрессивных технологий.

Адрес: Тольяттинский государственный университет,
445020, Россия, г. Тольятти, ул. Белорусская, 14.
E-mail: vitaliy.poluyanov@gmail.com

Рааб Арсений Георгиевич, кандидат технических наук, научный сотрудник.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: agraab@mail.ru

Рааб Георгий Иосифович, доктор технических наук, ведущий научный сотрудник.

Адрес: Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова,
455000, Россия, г. Магнитогорск, пр-т. Ленина, 38.
E-mail: giraab@mail.ru

Садрисламов Артем Радифович, магистрант.

Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: artem22sad@gmail.com

Саркеева Елена Александровна, старший преподаватель кафедры материаловедения и физики металлов.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: Sarkeeva.e@inbox.ru

Селиванов Алексей Сергеевич, кандидат технических наук,
начальник научно-технического отдела.
Адрес: ООО «Аттестационный центр СваркаТехСервис»,
450001, Россия, г. Уфа, ул. Пархоменко, 155/1.
E-mail: selivanov@naks-rb.ru

Семенов Александр Сергеевич, кандидат физико-математических наук, доцент.
Адрес: Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета
им. М.К. Аммосова в г. Мирном,
678170, Россия, г. Мирный, ул. Тихонова, 5, корп. 1.
E-mail: sash-alex@yandex.ru

Терентьев Дмитрий Александрович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник.
Адрес: Бельгийский центр ядерных исследований,
2400, Бельгия, г. Мол, Буретанг, 200.
E-mail: dmitry.terentyev@sckcen.be

Титов Вячеслав Викторович, аспирант кафедры материаловедения и физики металлов.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: molotovmelnik@gmail.com

Фаизов Ильшат Альбертович, кандидат физико-математических наук, главный специалист.
Адрес: ООО «РН-БашНИПИнефть»,
450006, Россия, г. Уфа, ул. Ленина, 86/1.
E-mail: iafaiz@mail.ru

Фаизова Светлана Никитична, кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры общей и теоретической физики, доцент кафедры водоснабжения и водоотведения.
Адрес 1: Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
453103, Россия, г. Стерлитамак, пр-т Ленина, 49.
Адрес 2: Уфимский государственный нефтяной технический университет,
450064, Россия, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1.
E-mail: snfaiz@mail.ru

Федотова Дарья Дмитриевна, бакалавр кафедры материаловедения и технологии материалов.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: dariafedotowa@mail.ru

Шарапова Юлия Равильевна, научный сотрудник.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: ulya_usinsk@mail.ru

Шишкунова Мария Андреевна, магистрант.
Адрес: Уфимский государственный авиационный технический университет,
450008, Россия, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.
E-mail: shishkunomashaa@gmail.com

OUR AUTHORS

Abdullina Dina Uralovna, Master of Chair of Materials Science and Physics of Metals.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: dina.abdullina25@gmail.com

Aksenov Denis Alekseevich, junior researcher.
Address 1: Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center
of the Russian Academy of Sciences,
450054, Russia, Ufa, Prospekt Oktyabrya, 71.
Address 2: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: aksyonovda@mail.ru

Alexandrov Igor Vasilievich, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,
professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: igorvalexandrov@yandex.ru

Asfandiyarov Rashid Nailevich, PhD (Engineering), researcher,
assistant professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals.
Address 1: Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center
of the Russian Academy of Sciences,
450054, Russia, Ufa, Prospekt Oktyabrya, 71.
Address 2: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: a.r.n@list.ru

Astanin Vasily Vladimirovich, junior researcher of Chair of Electrical Engineering.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: v.astanin@gmail.com

Atroshchenko Valery Vladimirovich, Doctor of Sciences (Engineering),
Head of Chair of Modern Methods of Welding and Structural Control.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: 91250@mail.ru

Babicheva Rita Ismagilovna, PhD (Physics and Mathematics),
researcher of the School of Mechanical and Aerospace Engineering.
Address: Nanyang Technological University,
639798, Singapore, Singapore, Nanyang Avenue, 50.
E-mail: ri.babicheva@mail.ru

Bebikhov Yuri Vladimirovich, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor.
Address: Polytechnic Institute (branch) of M.K. Ammosov North-Eastern Federal University in Mirny,
678170, Russia, Mirny, Tikhonov Street, 5, block 1.
E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

Begun Marina Eduardovna, student, a technician of the Research Institute of Advanced Technologies.
Address: Togliatti State University,
445020, Russia, Togliatti, Belorusskaya Street, 14.
E-mail: feanorhao@gmail.com

Bryzgalov Vladimir Aleksandrovich, graduate student.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: bryzgalovv2000@gmail.com

Dmitriev Sergey Vladimirovich, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, leading researcher.

Address: Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences,
450075, Russia, Ufa, Prospekt Oktyabrya, 151.
E-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

Enikeev Nariman Airatovich, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), senior researcher of laboratory “Metals and Alloys under the Extreme Conditions”, professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals.

Address 1: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
Address 2: Bashkir State University,
450076, Russia, Ufa, Zaki Validi Street, 32.
E-mail: nariman.enikeev@ugatu.su

Faizov Ilshat Albertovich, PhD (Physics and Mathematics), chief specialist.

Address: RN-BashNIPIneft LLC,
450054, Russia, Ufa, Lenin Street, 86/1.
E-mail: iafaiz@mail.ru

Faizova Svetlana Nikitichna, PhD (Physics and Mathematics), assistant professor of Chair of General and Theoretical Physics, assistant professor of Chair of Water Supply and Disposal.

Address 1: Sterlitamak branch of Bashkir State University,
453103, Russia, Sterlitamak, Lenin Prospekt, 49.
Address 2: Ufa State Petroleum Technological University,
450064, Russia, Ufa, Kosmonavtov Street, 1.
E-mail: snfaiz@mail.ru

Fedotova Darya Dmitrievna, bachelor of Chair of Materials Science and Materials Technology.

Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: dariafedotowa@mail.ru

Galiakhmetova Leysan Khalilovna, PhD (Physics and Mathematics), researcher.

Address: Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS,
450001, Russia, Ufa, Stepan Khalturin Street, 39.
E-mail: lesya813rys@gmail.com

Gunderov Dmitry Valeryevich, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), leading researcher of the Institute of Physics of Molecules and Crystals, professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals.

Address 1: Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences,
450054, Russia, Ufa, Prospekt Oktyabrya, 71.
Address 2: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: dimagun@mail.ru

Gunderova Sofia Dmitrievna, student.

Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: gynderova@mail.ru

Kapustin Aleksey Vladimirovich, postgraduate student of Chair of Materials Science and Physics of Metals.

Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: kapustin129@yandex.ru

Kazakov Arseny Maksimovich, student.

Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: arseny.m.kazakov@gmail.com

Korznikova Elena Aleksandrovna, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: elena.a.korznikova@gmail.com

Lobachev Vladislav Sergeevich, engineer of Scientific and Technical Department.
Address: Limited Liability Company “Attestation Center SvarkaTechService”,
450001, Russia, Ufa, Parkhomenko Street, 155.
E-mail: Vladik1997okt@mail.ru

Logachev Yury Vladimirovich, graduate student.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: yuryk33@mail.ru

Medvedev Andrey Evgenyevich, PhD (Physics and Mathematics),
junior researcher.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: medvedev.ae@ugatu.su

Merson Dmitry Lvovich, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,
Director of the Research Institute of Advanced Technologies.
Address: Togliatti State University,
445020, Russia, Togliatti, Belorusskaya Street, 14.
E-mail: D.Merson@tltsu.ru

Merson Evgeny Dmitrievich, PhD (Physics and Mathematics),
senior researcher of the Research Institute of Advanced Technologies.
Address: Togliatti State University,
445020, Russia, Togliatti, Belorusskaya Street, 14.
E-mail: mersoned@gmail.com

Murashkin Maksim Yurievich, PhD (Engineering), senior researcher.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: maksim.murashkin.70@yandex.ru

Myagkikh Pavel Nikolaevich, junior researcher of the Research Institute of Advanced Technologies.
Address: Togliatti State University,
445020, Russia, Togliatti, Belorusskaya Street, 14.
E-mail: feanorhao@gmail.com

Poluyanov Vitaly Aleksandrovich, PhD (Engineering),
junior researcher of the Research Institute of Advanced Technologies.
Address: Togliatti State University,
445020, Russia, Togliatti, Belorusskaya Street, 14.
E-mail: vitaliy.poluyanov@gmail.com

Raab Arseniy Georgievich, PhD (Engineering), researcher.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: agraab@mail.ru

Raab Georgy Iosifovich, Doctor of Sciences (Engineering), leading researcher.
Address: G.I. Nosov Magnitogorsk State Technical University,
455000, Russia, Magnitogorsk, Lenin Prospekt, 38.
E-mail: giraab@mail.ru

Sadrislamov Artyom Radifovich, graduate student.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: artem22sad@gmail.com

Sarkeeva Elena Aleksandrovna, senior lecturer of Chair of Materials Science and Physics of Metals.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: Sarkeeva.e@inbox.ru

Selivanov Aleksey Sergeevich, PhD (Engineering), Head of Scientific and Technical Department.
Address: Limited Liability Company “Attestation Center SvarkaTechService”,
450001, Russia, Ufa, Parkhomenko Street, 155/1.
E-mail: selivanov@naks-rb.ru

Semenov Aleksandr Sergeevich, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor.
Address: Polytechnic Institute (branch) of M.K. Ammosov North-Eastern Federal University in Mirny,
678170, Russia, Mirny, Tikhonov Street, 5, block 1.
E-mail: sash-alex@yandex.ru

Sharapova Yuliya Ravilievna, researcher.
Address: Ufa State Aviation Technical University, 450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: ulya_usinsk@mail.ru

Shishkunova Mariya Andreevna, graduate student.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: shishkunomashaa@gmail.com

Terentyev Dmitry Aleksandrovich, PhD (Physics and Mathematics), researcher.
Address: SCK-CEN (Belgian Nuclear Research Centre),
2400, Belgium, Mol, Boeretang, 200.
E-mail: dmitry.terentyev@sckcen.be

Titov Vyacheslav Viktorovich, postgraduate student of Chair of Materials Science and Physics of Metals.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: molotovmelnik@gmail.com

Valiev Ruslan Zufarovich, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor,
professor of Chair of Materials Science and Physics of Metals.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: valiev.rz@ugatu.su

Zaynullina Liliya Ilgizovna, senior lecturer of Chair of Materials Science and Physics of Metals.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: ZaynullinaLI@yandex.ru

Zhukova Olga Olegovna, postgraduate student of Chair of Materials Science and Materials Technology.
Address: Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Ufa, Karl Marks Street, 12.
E-mail: olga.zhukova96@mail.ru

Zinovev Alexandr Viktorovich, PhD (Physics and Mathematics), researcher.
Address: SCK-CEN (Belgian Nuclear Research Centre),
2400, Belgium, Mol, Boeretang, 200.
E-mail: aleksandr.zinovev@sckcen.be

На обложке: Микроструктура Al–2,5Fe в исходном состоянии (литье в электромагнитный кристаллизатор). Границы ячеек чистого алюминия образованы непрерывными цепочками частиц интерметаллидной фазы Al₂Fe (белые стрелки). Авторы фото: А.Е. Медведев, к. ф.-м. н., младший научный сотрудник; О.О. Жукова, аспирант; Д.Д. Федотова, бакалавр; М.Ю. Мурашкин, к. т. н., старший научный сотрудник (Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, Россия).