

Проект «Механизмы формирования новых материалов, структурно-фазовых состояний и градиентных структур в процессах аддитивных технологий»

Форма 501. КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ

Содержательная научная часть отчета.

На этапе 2015 года развитый в 2014 году многомасштабный подход к описанию динамики движения межфазных границ, механизмов формирования химического и фазового состава был использован для расчета и анализа порошковых систем, применяемых в аддитивных технологиях (АТ). Теоретические исследования выполнены для карбонильного железа, никеля, системы Ti-Al. Впервые получена структурная диаграмма железа для условий сосуществования объемно-центрированной и гранецентрированной кристаллических решёток и оценен эффект примесного сопротивления в сплаве Ti45Al55. Впервые получены численные и аналитические решения роста граней кристаллов по методу кристаллического фазового поля. На основе этих решений получены зависимости скорости роста и параметра решетки от движущей силы затвердевания. Используя модели фазового поля и модели с резкой границей, выполнено количественное сравнение кинетики роста кристаллов с экспериментальными данными во всем диапазоне переохлаждений при кристаллизации расплавов Ni и Ti45Al55. Во втором блоке теоретических исследований для карбонильного железа и Ti-Al выполнено моделирование тепловых полей и усадки порошкового слоя с целью оценки условий получения компактов с высокой относительной плотностью. В экспериментальной части определены параметры решетки образцов, полученных из порошков карбонильного железа для различных интенсивностей/скоростей лазерной закалки на основании данных РСА. Дополнительно к первоначальному плану работ получены перспективные карбидно-вольфрамовые и углеродсодержащие покрытия с уникальными физико-химическими свойствами, имеющими перспективы практического использования. Таким образом, во 2-й год выполнения проекта проведено сравнение теоретических и экспериментальных результатов для порошковых систем, применяемых в аддитивных технологиях.

Форма 502. КРАТКИЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ

Содержательная научная часть отчета, публикуемая на сайте Фонда

In 2015, the developed in 2014 multiscale approach to description of interface dynamics and formation of chemical and phase composition was used for simulation and analysis of powders being in use in additive manufacturing (AM). The theoretical study has been performed for iron, nickel and Ti-Al alloy. For the first time, a structural diagram for iron was received under conditions of coexistence between the bulk-centered and face-centered crystal lattice. Also the solute drag effect for Ti45Al55 is rigorously studied. The numerical and analytical solutions of crystal growth mechanisms are obtained using the phase-field crystal method. Based on these data, the dependence of growth velocity and lattice parameter on the driving force of solidification are suggested. With the sharp-interface and diffusive phase field model, quantitative comparison of the predicted and measured kinetics of solidification in Ni and Ti45Al55 is completed. In the second theoretical work package, simulation of the thermal fields and compaction in iron and Ti-Al predicted the expected processing conditions for high density compacts with good adhesion. In the experimental part, the lattice parameter as a function of laser power and scanning velocity is determined for iron powder using X-ray spectroscopy. In addition to the initial work schedule, new WC and carbon coatings with advanced physical and

chemical properties suitable for practical applications are developed. Therefore, in the second year of this project comparison between theoretical and experimental results is completed for the industrially oriented powder used in additive manufacturing.

Объявленные ранее цели и основные задачи проекта на 2015 год

Проект направлен на решение фундаментальной научной проблемы по созданию фундаментальных теоретических основ, математических моделей и вычислительных алгоритмов для прогнозирования динамики движения межфазных границ, химического состава и электрохимического поведения металлических композиционных материалов, полученных методами аддитивных технологий. Конечной целью проекта является разработка метода многомасштабного описания динамики изменения фазово-структурных характеристик при синтезе композиционных металлических материалов.

Целями этапа 2015 году являлось дальнейшее развитие фундаментальных основ аддитивных технологий с большим акцентом на разработку методов описания структурных превращений, структуро- и дефектообразования на нанометровых и субмикронных пространственных масштабах. Для достижения этих целей были решены 4 междисциплинарных задачи.

Задача № 1. Создание физико-математической модели фазового кристаллического поля для однокомпонентных систем, описывающей структуро- и дефектообразования на нанометровых масштабах (1-100 нм) в процессах плавления и кристаллизации. Создание аналитической модели структурных превращений на основе амплитудного представления уравнений кристаллического фазового поля для быстрой оценки и качественного анализа структурных превращений.

Задача № 2. Мезоскопическое описание и количественный анализ фазовых превращений в рамках традиционной модели фазового поля и модели с резкой границей. Связь с атомистическим моделированием по методу кристаллического фазового поля.

Задача № 3. Проведение трехмерных расчетов термических режимов спекания и усадки порошковой смеси при импульсной лазерной обработке порошков карбонильного железа и системы титан-алюминий.

Задача № 4. Экспериментальный анализ режимов лазерной обработки и исследование их влияния на градиентные свойства покрытий.

Степень выполнения поставленных в проекте задач

Все поставленные в проекте задачи выполнены полностью.

Полученные в ходе выполнения проекта результаты-объекты интеллектуальной собственности (номера патентных заявок и т.п.)

С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, М.Д. Кривилев, Э.Е. Садиоков, Ф.З. Гильмутдинов. Патент на изобретение РФ №2553737 «Катод для электрохимического получения водорода и способ его изготовления». Приоритет изобретения 01 марта 2013 года, дата регистрации в государственном реестре изобретений 22 мая 2015 г.

ПОЯСНЕНИЕ: Полученный патент РФ на изобретение описывает как материал катода с улучшенными электрохимическими свойствами, так и способ его изготовления. Способ изготовления заключается в синтезе катод требуемых структурно-фазовых состояний методом лазерной обработки порошков, что напрямую относится к задачам проекта.

Участие в 2015 году в научных мероприятиях по тематике Проекта

1. I. Starodumov, J. Bueno, H. Gomez, P.K. Galenko, D. Alexandrov, "Modeling of patterns by the phase field crystal method in three dimensions". 5th European Conference on Crystal Growth (ECCG5), Bologna, Italy, 9-11 September 2015.
2. P.K. Galenko, D.V. Alexandrov, D.A. Danilov, K. Reuther, M. Rettenmayr, D.M. Herlach, „Modeling of rapid dendritic growth under earthly and reduced gravity conditions“. Symposium EUROMAT 2015, Warsaw, Poland, 20 - 24 September, 2015.
3. Е.В. Харанжевский, М.Д. Кривилев С.М. Решетников. Физические и технологические основы создания наноструктурных функциональных покрытий короткоимпульсным лазерным синтезом // Тезисы Пятой Международной конференции «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к Наноиндустрии», Ижевск, 02.04.2015.
4. Э.Е. Садиоков, С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, М.Д. Кривилев. Исследование коррозионно-электрохимического поведения наноразмерных композитных слоев, полученных лазерным спеканием ультрадисперсных порошков железо–никель // Тезисы Пятой Международной конференции «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к Наноиндустрии», Ижевск, 02.04.2015.
5. С.М. Решетников, Е.В. Харанжевский, М.Д. Кривилев, Э. Е. Садиоков. Повышение коррозионной стойкости нелегированной стали нанесением наноструктурных оксидоникелевых слоев методом импульсного лазерного облучения // Тезисы Пятой Международной конференции «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к Наноиндустрии», Ижевск, 02.04.2015.
6. Г.А. Гордеев. Разработка программного комплекса для прогнозирования характеристик изделий, получаемых методом 3D-печати при селективном лазерном спекании металлических порошков // Устное выступление в программе У.М.Н.И.К. Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере, Ижевск, 2015
7. Г.А. Гордеев. Разработка программного комплекса для прогнозирования характеристик металлических изделий, получаемых 3D лазерной печатью // Устное выступление на инновационной конференции «Startup Village», наукоград Сколково, Москва, 2-3 июня 2015 г.
8. В.Е. Анкудинов. Разработка программного обеспечения для прогноза характеристик структурной и химической микронеоднородности при литье металлов // Устное выступление на инновационной конференции «Startup Village», наукоград Сколково, Москва, 2-3 июня 2015 г.
9. Г.А. Гордеев. Разработка программного комплекса для прогнозирования характеристик изделий, получаемых методом 3D-печати при селективном лазерном спекании металлических порошков. Диплом победителя VIII Республиканского конкурса инновационных проектов по программе "УМНИК" Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере.

Адреса (полностью) ресурсов в Интернете, подготовленных авторами по данному проекту

<http://lnsm.school.udsu.ru/projects>

Библиографический список всех публикаций по проекту, опубликованных в 2015 году, в порядке значимости: монографии, статьи в научных изданиях

1. Haifeng Wang, P.K. Galenko, Xiao Zhang, Wangwang Kuang, Feng Liu, D.M. Herlach. *Abrupt disappearance of solute drag in a hyperbolic phase-field model of rapid solidification*, Acta Materialia **90** (2015) 282-291.
2. E. Kharanzhevskiy and A. Ipatov and I. Nikolaeva and R. Zakirova. *Short-Pulse Laser Sintering of Multilayer Hard Metal Coatings: Structure and Wear Behavior*. Lasers in Manufacturing and Materials Processing. 2015. Vol. 2. P. 91-102. DOI 10.1007/s40516-015-0008-1.
3. В.Г. Лебедев, А.А.Лебедева, П.К. Галенко, *О мезоскопическом описании локально-неравновесных процессов затвердевания чистых веществ*. Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 2 (2015) 143 – 147.
4. P.K. Galenko, F.I. Sanches, and K.R. Elder, *Traveling wave profiles for a crystalline front invading liquid states: analytical and numerical solutions*. Physica D: Nonlinear Phenomena **308**(2015) 1-10.
5. D.V. Alexandrov and P.K. Galenko, *Thermo-solutal and kinetic regimes of an anisotropic dendrite growing under forced convective flow*, Physical Chemistry Chemical Physics **17** (2015) 19149-19161.
6. Костенков С.Н. Затухание интенсивности лазерного излучения при взаимодействии с высокодисперсными порошковыми средами. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности: 01.04.07 - Физика конденсированного состояния. Диссертационный совет Д 004.025.01. Дата и время защиты диссертации: 15.05.2015.
7. P.K. Galenko, D.A. Danilov, D.V. Alexandrov, *Solute redistribution around crystal shapes growing under hyperbolic mass transport*. International Journal of Heat and Mass Transfer **89** (2015) 1054-1060.
8. Е. В. Харанжевский, М. Д. Кривилев, С. М. Решетников, И. С. Николаева, Е. М. Борисова. *Коррозионно-электрохимические свойства карбидовольфрамowych покрытий, полученных короткоимпульсным лазерным облучением*. Ч. I. Получение и аттестация покрытий // Коррозия: материалы, защита. №8. 2015. С.42-47.
9. Харанжевский Е.В., Решетников С.М., Гильмутдинов Ф.З., Писарева Т.А. *Коррозионно-электрохимическое поведение наноразмерных графитных слоев, нанесенных на поверхность нелегированной стали импульсным лазерным облучением* // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2015. том 51, № 5, с. 495–502.
10. Гольдфарб В.И. Решетников С.М. Трубачев Е.С. Харанжевский Е.В. Кузнецов А.С. Корнилов А.А. *Экспериментальное исследование материалов опор скольжения колеса и смазочных материалов в низкоскоростных тяжело нагруженных спиральных редукторов* // Вестник машиностроения. 2015. №5. С 53-60.