



ОТЧЕТ

О РАБОТЕ НАУЧНОГО СОВЕТА РАН ПО МАТЕРИАЛАМ И НАНОМАТЕРИАЛАМ

2020 год

Научный совет РАН по наноматериалам организован при Президиуме РАН постановлением Президиума РАН № 97 от 9 апреля 2002 г.

Постановлением президиума РАН от 26 января 2016 г. № 18 «Научный совет РАН по наноматериалам» переименован в «Научный совет РАН по материалам и наноматериалам», утверждено Положение о Совете и его измененный состав

Постановлением президиума РАН № 58 от 10 апреля 2019 г. утверждено Положение о Научном совете РАН по материалам и наноматериалам и состав Совета.

Состав Научного совета РАН по материалам и наноматериалам Бюро совета

Алдошин С.М.	- академик РАН, председатель
Каблов Е.Н.	- академик РАН, заместитель председателя
Карпов М.И.	- член-корреспондент РАН, заместитель председателя
Цивадзе А.Ю.	- академик РАН, заместитель председателя
Бадамшина Э.Р.	- доктор химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук, ученый секретарь
Алешин Н.П.	- академик РАН
Алфимов М.В.	- академик РАН
Алымов М.И.	- член-корреспондент РАН
Леонтьев Л.И.	- академик РАН
Ляхов Н.З.	- академик РАН

Члены совета

Бойнович Л.Б.	- академик РАН
Бузник В.М.	- академик РАН
Бухтияров В.И.	- академик РАН
Валиев Р.З.	- доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уфимский государственный авиационный технический университет» (по согласованию)
Волова Т.Г.	- доктор биологических наук, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» Институт биофизики (по согласованию)

Глезер А.М.	- доктор физико-математических наук, Федеральное государственное унитарное предприятие «Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И.П.Бардина» (по согласованию)
Гмошинский И.В.	- доктор биологических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «ФИЦ питания и биотехнологии» (по согласованию)
Грачев В.А.	- член-корреспондент РАН
Добаткин С.В.	- доктор технических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук (по согласованию)
Иванов В.В.	- член-корреспондент РАН
Иванов В.П.	- кандидат технических наук, некоммерческая организация «Российский Союз предприятий и организаций химического комплекса» (Российский Союз химиков) (по согласованию)
Иевлев В.М.	- академик РАН
Канель Г.И.	- член-корреспондент РАН
Колобов Ю.Р.	- доктор физико-математических наук, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Белгородский государственный национальный исследовательский университет" (по согласованию)
Конов В.И.	- академик РАН
Краснянский М.Н.	- доктор технических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Тамбовский государственный технический университет» (по согласованию)
Кулаковский В.Д.	- член-корреспондент РАН
Куличихин В.Г.	- член-корреспондент РАН
Лунин В.В.	- академик РАН
Лысак В.И.	- академик РАН
Мажуга А.Г.	- доктор химических наук, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева"

Мелихов И.В.	-	член-корреспондент РАН
Микитась А. В.	-	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Фонд содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере» (по согласованию)
Мулюков Р.Р.	-	член-корреспондент РАН
Озерин А.Н.	-	член-корреспондент РАН
Рудской А.И.	-	академик РАН
Санин В. Н.	-	доктор технических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук (по согласованию)
Солнцев К.А.	-	академик РАН
Стегайлов В.В.	-	доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (по согласованию)
Ткачев А.Г.	-	доктор технических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Тамбовский государственный технический университет» (по согласованию)
Хохлов А.Р.	-	академик РАН
Цветков Ю.В.	-	академик РАН
Чурбанов М.Ф.	-	академик РАН
Шайтан К.В.	-	доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова» (по согласованию)
Шевченко В.Я.	-	академик РАН
Якобовский М.В.	-	член-корреспондент РАН
Ярославцев А.Б.	-	член-корреспондент РАН

Положение о Научном совете РАН по материалам и наноматериалам

1. Общие положения

1.1. Научный совет РАН по наноматериалам организован постановлением Президиума РАН от 9 апреля 2002 г. № 97.

Постановлением президиума РАН от 26 января 2016 г. № 18 Научный совет РАН по наноматериалам был преобразован в Научный совет РАН по материалам и наноматериалам.

Научный совет РАН по материалам и наноматериалам (далее – Совет) создан с целью содействия федеральному государственному бюджетному учреждению «Российская академия наук» (далее – Академия) в реализации задач и функций, возложенных на нее Федеральным законом от 27 сентября 2013 г. № 253-ФЗ «О Российской академии наук, реорганизации государственных академий наук и внесении изменений в отдельные законодательные акты Российской Федерации» и уставом РАН, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 27 июня 2014 г. № 589.

1.2. Совет является совещательным и научно-консультативным, координационным органом Академии.

1.3. Совет в своей деятельности руководствуется Конституцией Российской Федерации, законодательством Российской Федерации, уставом Академии, постановлениями общего собрания членов РАН, постановлениями президиума РАН, распоряжениями президента Академии и настоящим Положением.

1.4. Деятельность Совета осуществляется во взаимодействии с отделениями РАН по областям и направлениям науки, региональными отделениями Академии, структурными подразделениями аппарата президиума РАН, а также в информационном сотрудничестве с органами государственной власти, научными организациями и образовательными организациями высшего образования Российской Федерации независимо от их ведомственной принадлежности, иными заинтересованными организациями по вопросам, входящим в компетенцию Совета.

1.5. Совет имеет бланк со своим наименованием.

2. Порядок создания Совета

2.1. Совет состоит при президиуме РАН.

2.2. Решение о создании Совета принимается президиумом РАН по представлению президента Академии, вице-президентов Академии, главного ученого секретаря президиума РАН, членов президиума РАН.

2.3. Председатель Совета утверждается постановлением президиума РАН.

2.4. Положение о Совете его состав и структура утверждаются президиумом РАН. Изменения и дополнения в Положение о Совете, в его составе и структуре осуществляется постановлением президиума РАН.

2.5. Совет может быть реорганизован или ликвидирован постановлением президиума РАН.

3. Основные задачи и функции Совета

3.1. Основной целью Совета является оказание содействия Академии в реализации возложенных на него законодательством Российской Федерации и уставом РАН задач и функций.

3.2. Деятельность Совета направлена на решение следующих основных задач:

3.2.1. изучение, анализ достижений и прогноз развития отечественной и мировой науки, определение приоритетных направлений ее развития в области материалов и наноматериалов;

3.2.2. участие в научно-консультативном и экспертном обеспечении деятельности государственных органов и организаций;

3.2.3. координация научной и научно-технической деятельности в области материалов и наноматериалов;

3.2.4. популяризация и пропаганда науки, научных знаний, достижений научных исследований.

3.3. Для реализации своих основных задач Совет выполняет следующие функции:

3.3.1. проводит анализ состояния и тенденций развития отечественной и мировой науки в области материалов и наноматериалов;

3.3.2. участвует в разработке предложений по определению приоритетных направлений развития фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований в Российской Федерации в области материалов и наноматериалов с учетом мировых тенденций развития науки;

3.3.3. участвует в подготовке предложений по формированию государственных программ научных исследований в области материалов и наноматериалов;

3.3.4. участвует в разработке предложений об использовании результатов законченных научно-исследовательских работ в области материалов и наноматериалов;

3.3.5. участвует в осуществлении экспертного научного обеспечения деятельности государственных органов и организаций в области материалов и наноматериалов;

3.3.6. способствует организации и координации комплексных научных исследований на междисциплинарном и межведомственном уровнях в области материалов и наноматериалов;

3.3.7. представляет предложения по развитию материальной и социальной базы науки, повышение степени интеграции науки и образования, социальной защищенности научных работников;

3.3.8. участвует в работе с молодыми учеными, по привлечению талантливой молодежи к научной деятельности, в разработке предложений по совершенствованию подготовки научных кадров;

3.3.9. участвует в подготовке к изданию аналитических и информационных материалов по тематике материалов и наноматериалов;

3.3.10. участвует в пропаганде и популяризации науки, научных знаний и достижений;

3.3.11. содействует укреплению связей Академии с научными организациями и образовательными организациями высшего образования, выполняющими фундаментальные научные исследования и поисковые научные исследования, иными заинтересованными организациями, органами государственной власти Российской Федерации, органами государственной власти субъектов Российской Федерации, органами местного самоуправления, иными государственными органами;

3.3.12. устанавливает необходимые контакты и взаимодействие с другими советами, комитетами и комиссиями Академии;

3.3.13. оказывает содействие в развитии и укреплении международных связей с научными организациями, работающими в области материалов и наноматериалов;

3.3.14. участвует в организации национальных и международных научных конференций, симпозиумов, выставок, семинаров и школ по вопросам, относящимся к области материалов и наноматериалов;

3.3.15. участвует в иных научных и научно-организационных мероприятиях, проводимых Академией;

3.3.16. рассматривает другие вопросы по поручению президиума РАН;

3.3.17. готовит для соответствующих министерств и ведомств аналитические записки о состоянии фундаментальных наук в Российской Федерации и о важнейших научных достижениях, полученных российскими учеными в области материалов и наноматериалов.

4. Состав и структура Совета

4.1. Совет формируется в составе председателя, заместителей председателя, ученого секретаря и членов Совета.

4.2. Членами Совета могут быть члены РАН, сотрудники аппарата президиума РАН, а также по согласованию ведущие ученые и представители научных организаций и образовательных организаций высшего образования, научных центров, научных и научно-технических обществ, институтов развития, органов государственной власти и других организаций, участвующих в научных исследованиях по направлениям деятельности Совета. К деятельности Совета по согласованию могут привлекаться зарубежные ученые.

4.3. В Совете может быть образовано бюро в составе председателя, его заместителей, ученого секретаря и членов бюро.

4.4. В структуре Совета для решения возложенных на него задач могут быть организованы секции по отдельным направлениям деятельности, постоянные или временные рабочие группы, комиссии (подкомиссии).

4.5. Председатель Совета:

4.5.1. утверждает план работы Совета, повестку заседания и состав лиц, приглашаемых на заседание Совета;

4.5.2. организует работу Совета и председательствует на заседаниях;

4.5.3. подписывает протоколы заседаний и другие документы Совета;

4.5.4. обеспечивает коллективное обсуждение вопросов, внесенных на рассмотрение Совета;

4.5.5. формирует отчет о проделанной работе и наиболее важных результатах, полученных в рамках деятельности Совета;

4.5.6. распределяет обязанности между своими заместителями.

4.6. Заместитель председателя Совета:

4.6.1. курирует одно или несколько направлений деятельности Совета;

4.6.2. участвует в подготовке планов работы Совета;

4.6.3. участвует в подготовке отчета о проделанной работе и наиболее значимых результатах, полученных в рамках деятельности Совета;

4.6.4. в отсутствие председателя осуществляет руководство Советом.

4.7. Ученый секретарь Совета:

4.7.1. организационно обеспечивает работу Совета, готовит рабочие материалы к заседаниям, оформляет протоколы заседаний;

4.7.2. готовит и согласовывает с председателем проекты документов и других материалов для обсуждения на заседаниях Совета;

4.7.3. уведомляет членов Совета о дате, месте и повестке предстоящего заседания;

4.7.4. рассылает членам Совета документы и материалы;

4.7.5. участвует в подготовке отчета о проделанной работе и наиболее значимых результатах, полученных в рамках деятельности Совета;

4.7.6. обеспечивает хранение документации Совета.

4.8. Члены Совета:

4.8.1. руководствуются положением о Совете;

4.8.2. регулярно посещают заседания Совета, назначенные его председателем;

4.8.3. своевременно выполняют поручения Совета;

4.8.4. обеспечивают связь Совета с представляемыми ими организациями;

4.8.5. вносят предложения и замечания к планам работы и по текущей деятельности Совета в целях повышения его эффективности;

4.8.6. запрашивают информацию о рассмотрении своих предложений;

4.8.7. получают информацию о деятельности Совета;

4.8.8. вносят предложения по формированию повестки дня заседаний Совета;

4.8.9. по поручению председателя возглавляют секции, рабочие группы и комиссии (подкомиссии) Совета;

- 4.8.10. участвуют в подготовке материалов по рассматриваемым вопросам;
- 4.8.11. выступают с докладами на заседаниях Совета.

5. Порядок работы Совета

5.1. Совет работает в соответствии с ежегодными планами, утверждаемыми его председателем.

5.2. Совет решает вопросы в пределах задач и полномочий, возложенных на него настоящим положением.

5.3. Совет для решения возложенных на него задач и осуществления функций вправе:

5.3.1. рассматривать и принимать решения по вопросам профильной деятельности в области материалов и наноматериалов на своих заседаниях или заседаниях бюро;

5.3.2. создавать секции, постоянные или временные рабочие группы, комиссии (подкомиссии) для решения задач, входящих в компетенцию Совета;

5.3.3. проводить плановые, внеочередные и заочные мероприятия (координационные совещания, конференции, сессии и симпозиумы) по вопросам деятельности Совета в области материалов и наноматериалов;

5.3.4. по согласованию с руководителями научных организаций и образовательных организаций высшего образования, а также научных центров, научных и научно-технических обществ, институтов развития и других организаций запрашивать материалы по вопросам, относящимся к деятельности Совета;

5.3.5. приглашать на свои заседания с правом совещательного голоса представителей заинтересованных организаций, членов РАН, ведущих российских ученых, сотрудников аппарата президиума РАН, представителей органов государственной власти;

5.3.6. готовить и при необходимости выносить на обсуждение президиума РАН вопросы по профилю Совета.

5.4. Заседания Совета созываются по решению председателя или бюро по мере необходимости. Заседания могут проводиться с использованием технических средств аудио- и/или видео-конференц-связи.

5.5. В перерывах между заседаниями Совета оперативную работу может осуществлять бюро, которое правомочно принимать решения с последующим их утверждением на заседаниях Совета. Заседания бюро проводятся по мере необходимости. Решения бюро Совета принимаются простым большинством голосов присутствующих на заседании членов бюро открытым голосованием и оформляются протоколом заседания за подписью председателя и ученого секретаря Совета.

5.6. Совет правомочен принимать решения по рассматриваемым вопросам, если на заседании присутствует не менее половины из списочного состава членов Совета.

5.7. Решения Совета принимаются простым большинством голосов присутствующих на заседании открытым голосованием и оформляются протоколом за подписью председателя и ученого секретаря Совета.

5.8. Решения Совета носят рекомендательный характер.

5.9. Члены Совета могут квалифицированным большинством голосов принять решение о проведении тайного голосования по любому обсуждаемому ими вопросу.

5.10. Совет ежегодно до 1 марта представляет в президиум РАН отчеты о проделанной работе и наиболее значимые результаты, полученных в рамках своей деятельности.

5.11. Совет может иметь адрес в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», ссылка на который помещается на портале РАН.

РАБОТА

НАУЧНОГО СОВЕТА РАН
ПО МАТЕРИАЛАМ
И НАНОМАТЕРИАЛАМ
в 2020 г.

В 2020 г. было проведено три заседания Научного совета РАН по материалам и наноматериалам (далее – Совета), первое из которых было посвящено теме, начатой в предыдущем году – **особенностям поведения материалов в экстремальных условиях**. Это заседание прошло 18 марта со следующей повесткой:

1. Вступительное слово председателя Научного совета РАН, академика Сергея Михайловича Алдошина.

2. Первый заместитель генерального директора АО «Наука и инновации» ГК "Росатом", д.т.н., профессор Алексей Владимирович Дуб, постановочный доклад о потребностях и проблемных вопросах в области материалов и наноматериалов, необходимых для решения стратегических задач.



3. Научный руководитель проектного направления «Прорыв», научный руководитель АО «Ордена Ленина Научно-исследовательский и конструкторский институт энерготехники имени Н.А. Доллежалея» (АО «НИКИЭТ»), д.т.н., профессор Евгений Олегович Адамов, сообщение о проблемах конструкционных материалов для реакторов на быстрых нейтронах и объектов замкнутого топливного цикла.



4. Д.х.н., профессор РАН, г.н.с. ИК СО РАН Николай Юрьевич Адонин, проект "Разработка прямой безрастворной твердофазной опытно-промышленной технологии переработки реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена со специальной морфологией и наноструктурой в высокопрочные и высокомодульные пленочные нити различной номенклатуры" для его реализации в Фонде перспективных исследований – для экспертного заключения Совета (рецензенты - академик В.М. Бузник, академик Н.З. Ляхов)

5. Обсуждение, принятие решений.



1. Во вступлении С.М. Алдошин напомнил о порядке работы Научного совета, на котором обсуждаются запланированные проблемы, иногда на нескольких заседаниях, по ним готовятся решение и аналитическая записка, и далее она направляется и в Академию наук, и в органы исполнительной и законодательной власти, если требуется. Обычно обсуждаются конкретные проблемы по профилю Совета по материалам и наноматериалам, а на сегодняшнем заседании будут рассмотрены некие общие подходы к решению одного из важных направлений развития нашей экономики – создание новых материалов, что входит в приоритеты Стратегии научно-технологического развития нашей страны.

2. В своем докладе о потребностях и проблемных вопросах в области материалов и наноматериалов, необходимых для решения стратегических задач, А.В. Дуб отметил следующее (презентация доклада приведена в Приложении 1).

Основной целью Приоритетных направлений научно-технологического развития (ПН НТР)¹ Госкорпорации «Росатом» «Материалы и технологии» является обеспечение лидерства в области создания новых материалов и нормативной базы/сертификации для обеспечения безопасности и экономической эффективности эксплуатации ядерно-энергетических установок, построение двухкомпонентной ядерной энергетики на основе управления эволюцией микро- и наноструктуры.

Способ реализации – подход к материалам на всем жизненном цикле как к взаимоувязанной многоуровневой системе. Многоуровневый подход в разработке новых

¹ ПН НТР – основные направления научно-технологического развития атомной отрасли, направленные на достижение технологического превосходства, повышение технологической безопасности, снижение себестоимости, расширение экспортного потенциала Госкорпорации "Росатом", формирование нового источника дохода, достижение уникальных научных результатов

материалов и технологий позволяет оптимизировать выбор кандидатных материалов, в т.ч. сократить время разработки в 1,5-2 раза. Он основан на учете и использовании новых механизмов формирования свойств материалов и конечных изделий при одновременной корректировке нормативной базы на материалы. В результате реализуется сокращенный (за счет оптимизированных решений) цикл обоснования применения материала в конструкторской документации современных и перспективных АЭС.

Первый шаг в новой методике разработки материалов - Материаловедческое моделирование. В рамках ЕОТП (единый отраслевой перечень НИОКР для реализации научно-технической политики Госкорпорации «Росатом» и достижения технологического превосходства) разрабатываются и верифицируются модели и прогнозы распухания, фазовой стабильности и образования предвыделений для проектов Прорыв/ВВЭР: феррито-мартенситных сталей на примере (ЭК181, ЧС139) и аустенитных сталей (ЭК164, ЧС68). Интеграция разработанных моделей с базой данных по свойствам материалов позволит разработать вычислительные инструменты для поиска материалов (легирование, микроструктура) с заданными свойствами на основе информатики материалов. Например, традиционная отработка поликомпонентного легирования стали требует рассмотрения матрицы составов минимум из 64 вариантов. Вычислительные эксперименты позволяют сократить набор до 4-6 вариантов.

Второй шаг разработки материала – ускоренные испытания. Последние достижения в этой области позволяют в большинстве случаев ещё более сузить набор кандидатных материалов для проведения необходимых реакторных испытаний. Разрабатывается сквозная методика экспресс-анализа радиационной стойкости конструкционных материалов на основе высокодозного облучения на ускорителях ионами никеля, железа, гелия, механических испытаний на ползучесть под облучением ионами на циклотроне, прецизионного ультрамикроскопического анализа, просвечивающей микроскопии и синхротронного излучения, позволяющее подтверждать механизм старения. Верификация методики осуществляется по данным реакторных экспериментов применяемых материалов с учётом флакс-фактора. В рамках ЕОТП будут получены данные о радиационной стойкости КМ для ВКУ ВВЭР-СКД, характеристиках микроструктуры и оценки относительной радиационной стойкости для референтных КМ ферритно-мартенситного класса, дисперсно-упрочненных оксидами сталей в интервале температур от 300 до 600°C и диапазоне доз радиационных повреждений до 250 сна КМ разных классов: ферритно-мартенситные стали для активной зоны реактора БРЕСТ, ферритно-мартенситные и аустенитные стали для активной зоны реактора БН-1200.

Достижения предприятий Росатома в области перспективных технологий позволяют ставить и решать задачи разработки комплекса технологий и оборудования для аддитивного производства сложнопрофильных и крупногабаритных изделий атомной энергетики, в том числе керамических композитных материалов на базе SiC/SiC для деталей и узлов перспективной техники с повышенными температурными параметрами эксплуатации.

Важнейшим аспектом ускорения производственного процесса является разработка цифровых двойников процессов, протекающих при селективном лазерном сплавлении. Цифровые двойники станут основным инструментом программы топологической оптимизации, позволяющей не только снижать массу изделия до 60%, но и выбирать путь оптимизации по параметрам «срок-стоимость-качество» с главной задачей – получение изделия нужного дизайна и свойств «с первого раза».

Основные задачи по разработке новых материалов сосредоточены на материаловедческом обеспечении перспективных проектов:

- Для проекта ВВЭР-СКД требуется КМ корпуса реактора на срок службы до 60 лет для давления 27,5 МПа, температуры 500°C, флюенса $3 \cdot 10^{20}$ н/см², с обеспечением категории прочности КП65. КМ для ВКУ разрабатываются для температуры 500°C, флюенса $2 \cdot 10^{23}$ н/см² на тот же срок.

- Для проекта ВВЭР-С требуется КМ корпуса реактора, обеспечивающий увеличение флюенса на 20%.
- Для проекта АСММ требуются КМ, позволяющие существенно оптимизировать конструкцию с увеличением ресурса до 60 лет.
- Для проекта БН-1200 ведутся разработки материала для парогенератора (ПГ), позволяющего увеличить ресурс до 60 лет.
- Для проекта БРЕСТ проводится обоснование ресурса до 60 лет материалов теплообменных труб ПГ 600°C и ВКУ 550°C.
- Для проекта ЖСР проводится обоснование топливной соли и разработка КМ топливного контура и установки переработки соли, стойких для FLiBe (750°C) и FLiNaK (650°C)
- Для проекта ВТГР планируется разработка КМ ВКУ для температуры до 950°C, среда – гелий; температура графитовых блоков до 1200°C.

В зависимости от имеющейся при инициации проекта базы данных для верификации, а также технологического обеспечения рассматриваются металлические, керамические, композиционные материалы.

Композиционные материалы – разработана программа КНТП в плане решения задач в области углеродных материалов; полимерных композиционных материалов (ПАН-волокно, связующие); композиционных материалов для аддитивных технологий.

3. В сообщении о проблемах конструкционных материалов для реакторов на быстрых нейтронах и объектов замкнутого топливного цикла Е.О. Адамов сообщил следующее (презентация доклада приведена в Приложении 2).

Современная ядерная энергетика (ЯЭ) столкнулась с рядом проблем, для решения которых необходима новая технологическая платформа (НТП). Проектное направление «Прорыв» направлено на создание НТП крупномасштабной ЯЭ, как основы безуглеродной генерации, при обеспечении сырьевой независимости, детерминистической безопасности, экономической конкурентоспособности и технологическом усилении режима нераспространения.

Первым этапом НТП является создание двухкомпонентной ЯЭ, когда к действующей генерации на базе реакторов на тепловых нейтронах присоединяются АЭС с реакторами на быстрых нейтронах (РБН). Для производства смешанных уран-плутониевых нитридных и оксидных топливных составов необходима технология измельчения порошков до нано уровней, без применения механических мельниц. Применяемые в РБН жидкометаллические теплоносители потенциально могут обеспечить существенное повышение к.п.д. АЭС, однако для это требуется создание новых конструкционных материалов (КМ), поскольку существующие ограничивают температуру оболочек ТВЭ уровнем ниже 7000С, а радиационную стойкость 150 сна.

Выбор КМ ограничен необходимостью длительных и дорогостоящих реакторных испытаний, поэтому особую значимость приобретает математическое моделирование и наноструктурный анализ, потенциально способный сократить диапазон кандидатных КМ с тем, чтобы сосредоточиться на потенциально перспективных.

Вторым этапом НТП является развитие технологии переработки облучённого ядерного топлива, для чего необходимы КМ, работоспособные в азотнокислых растворах, при температурах выше 1000С, непористые керамики, устойчивые в расплавах LiCl, LiCl-KCl, LiF, материалы для вращающихся печей окисления/восстановления при температурах выше 13000С, КМ, устойчивые при воздействии расплавов боросиликатного и алюмофосфатного стёкол, при температурах 1300-1500 0С, радиационно-стойкие смазки.

В рамках проектного направления могут быть профинансированы НИОКР, обеспечивающие конкретные результаты в течение 3-5, в исключительных случаях 10 лет.

4. Выступление Н.Ю. Адонина по проекту «Разработка прямой безрастворной твердофазной опытно-промышленной технологии переработки реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена со специальной морфологией и наноструктурой в высокопрочные и высокомодульные пленочные нити различной номенклатуры» для его реализации в Фонде перспективных исследований. Проект представлен для получения по нему экспертного заключения Совета (рецензенты - академик В.М. Бузник, академик Н.З. Ляхов). (презентация доклада приведена в Приложении 3).

Проект посвящен разработке безрастворной твердофазной технологии прямой переработки реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена со специальной морфологией и наноструктурой в высокопрочные и высокомодульные пленочные нити. Актуальность работы обусловлена тем, что, несмотря на свои уникальные эксплуатационные свойства и характеристики, сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) менее распространен по сравнению с обычным полиэтиленом. Так, общее мировое потребление этого материала оценивается в 150-200 тыс. тонн в год. Мировое производство высокопрочных волокон из СВМПЭ - одного из его наиболее ответственного применения, составляет около 20 тыс. тонн в год (по данным на конец 2018 года). Это объясняется высокой стоимостью традиционной технологии переработки СВМПЭ в волокна, которая базируется на растворении СВМПЭ в высококипящих растворителях (таких как, декалин или парафиновое масло) с последующим выдавливанием горячего разбавленного раствора (с концентрацией не более 5 вес.% при температуре выше 100°C) через фильтры в осадительную ванну, где он превращается в гель. Далее из геля удаляют высококипящий растворитель, и полученный ксерогель подвергается ориентационному вытягиванию в печи (кратность вытяжки до 250 при температуре 100°C и более). В нашей стране промышленная технология гель-формования СВМПЭ до настоящего времени не освоена.

Сверхвысокомолекулярный полиэтилен, пригодный для безрастворной переработки, является многообещающей альтернативой традиционному СВМПЭ. Волокна и пленки, полученные твердофазным формованием СВМПЭ, обладают прочностью до 3,5 ГПа и модулем упругости до 150 ГПа. Достигнутые значения указанных характеристик делают подобные материалы исключительно перспективным дополнением к существующим материалам на основе СВМПЭ для создания на их основе легких и дешевых в производстве конструктивных элементов, особенно для изделий с критическими массоразмерными характеристиками.

В последнее десятилетие с использованием СВМПЭ, полученного на моноцентровых каталитических системах, были выполнены исследования по разработке новой технологии переработки СВМПЭ в высокопрочные и высокомодульные пленки и пленочные нити: в Голландии - группой S. Rastogi, а также в России – группой чл.-корр. РАН С.С. Иванчева (СПб филиал ИК СО РАН) и чл.-корр. РАН А.Н. Озерина (ИСПМ РАН). Суть этой технологии заключается в получении реакторных порошков СВМПЭ с использованием новых постметаллоценовых катализаторов при выбранных специальных режимах полимеризации (температура, давление этилена, структура и концентрация катализатора и др.), обеспечивающих формирование реакторных порошков СВМПЭ с особой морфологией и наноструктурой, пригодных для прямой безрастворной твердофазной переработке в высокопрочные и высокомодульные пленочные и волоконные изделия.

Предварительные исследования, выполненные в рамках завершенных в 2017-2019 гг. Фондом перспективных исследований аванпроектов "Полимер А1" и "Полимер А2", показали, что синтезированные на постметаллоценовых катализаторах реакторные порошки СВМПЭ могут быть переработаны не только безрастворным твердофазным способом, но и с помощью гель-технологии, а также классическими методами плунжерной и гидроэкструзии и горячего прессования полимеров.

В ходе реализации комплексного проекта «Полимер» предполагается решить задачи, связанные с масштабированием процессов приготовления катализаторов полимеризации этилена и процессов полимеризации этилена с целью получения РП СВМПЭ с заданными свойствами. В рамках проекта будет также спроектирована и изготовлена опытная линия производства высокопрочных пленочных нитей из РП СВМПЭ с прочностью 3.0 - 3.5 ГПа, обеспечивающую полный производственный цикл (от стадии подготовки мономера для синтеза до производства высокопрочных и высокомодульных пленочных нитей из СВМПЭ, материалов и изделий из них), с последующим созданием опытно-промышленного производства. Разрабатываемая технология исключает использование дорогостоящих, энергоемких, экологически сложных процессов и позволяет получать дешевые в производстве, легкие высокопрочные антибаллистические защитные и конструкционные материалы, сохраняющие комплекс своих упруго-прочностных характеристик при любой относительной влажности окружающей среды и при отрицательных температурах вплоть до -100оС.

Разработка научно-технологических основ получения материалов с заявляемыми характеристиками является критически важной не только для создания отечественного производства многослойной комбинированной брони, но и для производства широкого ассортимента практически важных промышленных изделий и конструкций, таких как легкие не тонущие в воде канаты и сети, высокопрочные технические ткани, химические стойкие мембраны и сепараторы для аккумуляторов и источников тока различного типа и т.п. Очевидно, что предлагаемые в настоящей заявке исследования являются актуальными и отвечают мировому уровню исследований и разработки научных основ промышленного производства перспективных композиционных и конструкционных материалов и инженерных пластиков.

Предполагаемый головной исполнитель проекта – ФИЦ «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН». Предполагаемые соисполнители проекта: Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, ЗАО ГК «Техполимер», ООО «НПП «Инжмет»

Заслушав и обсудив доклады, а также выступления членов Совета, приглашенных и рецензентов по третьему вопросу – академиков В.М. Бузника и Н.З. Ляхова, Научный Совет по материалам и наноматериалам вынес следующее решение.

1. Разослать всем членам Совета презентации А.В. Дуба и Е.О. Адамова с целью сбора предложений по включению предлагаемых направлений по материалам и наноматериалам в развиваемые Госкорпорацией «Росатом» проекты и формируемую Дорожную карту. Эти предложения будут отправлены от Научного совета докладчикам, после чего будет запланировано, при необходимости, заседание Совета с обсуждением потенциала предлагаемых работ.

2. По проекту «Разработка прямой безрастворной твердофазной технологии переработки реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) в пленочные нити» для его реализации в Фонде перспективных исследований Совет отмечает, принимая во внимание выступление рецензентов, что предлагаемый научно-технический проект носит прорывной характер и ориентирован на выполнение научных исследований и разработок в интересах обороны страны и безопасности государства, связанных с высокой степенью риска достижения качественно новых результатов в военно-технической, технологической и социально-экономической сферах, а также важность результатов проекта для ряда производственных отраслей Российской Федерации и подтверждает его актуальность, новизну и техническую обоснованность. Совет решил:

поддержать инновационный научно-технический проект Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»

«Разработка прямой безрастворной твердофазной технологии переработки реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) в пленочные нити», шифр «Полимер» и рекомендовать руководству Фонда перспективных исследований включить проект в перечень проектов Фонда перспективных исследований, а также запустить процедуру его реализации.

Заседание Совета, прошедшее 30 сентября 2020 г., положило начало обсуждению такой важной темы, как **моделирование материалов и их свойств и процессов с их участием**. В силу сложившейся эпидемиологической обстановки заседание проходило в смешанном режиме – очно и в режиме ВКС со следующей повесткой:

1. Вступительное слово председателя Научного совета РАН, академика Сергея Михайловича Алдошина.

2. Вступительное слово заместителя Министра науки и высшего образования РФ чл.-корр. РАН Сергея Владимировича Люлина.



3. Вступительное слово специального представителя Президента РФ по вопросам цифрового и технологического развития, директора направления «Молодые профессионалы» Агентства стратегических инициатив Пескова Дмитрия Николаевича.



4. Доклад академика Бориса Николаевича Четверушкина, д.ф.-м.н. Сергея Владимировича Полякова, чл.-корр. РАН Михаила Владимировича Якововского

(Институт прикладной математики имени М.В. Келдыша РАН) «Суперкомпьютерные технологии для решения задач материаловедения: проблемы и возможности».



5. Доклад д.ф.-м.н. Владимира Владимировича Стегайлова (Объединенный институт высоких температур РАН) «Атомистические и многомасштабные модели вещества: теоретические методы, прикладные задачи и суперкомпьютерные потребности».



6. Сообщение Генерального директора Исследовательского комплекса Центра технологического обеспечения Антона Эдуардовича Рязанцева «Проблемы вычислительного материаловедения для задач оптимального проектирования».



7. Сообщение начальника отдела ФГУП ВИАМ Дмитрия Сергеевича Лаврищева «Проблемные вопросы вычислительного материаловедения» (он-лайн)

8. Обсуждение, принятие решений.

В своем докладе (презентация доклада представлена в Приложении 4) академик Б.Н. Четверушкин сообщил, что проблемы и перспективы их решения в области материаловедения представляют значительный интерес. Это связано, с одной стороны, с

широким внедрением нанотехнологий в промышленности. С другой стороны, появились новые вызовы стратегического характера, определяющие развитие, в том числе атомной отрасли на многие десятилетия вперед. Сегодня недостаточно иметь законченные решения по широкому спектру задач материаловедения. Необходимо постоянное развитие этой отрасли знания, которая все более обращается к методам математического и компьютерного моделирования. Последнее невозможно без использования суперкомпьютерных технологий.

Привлечение высокопроизводительной вычислительной техники стало необходимым требованием практически всех масштабных исследований свойств новых материалов. На него опираются также и задачи инженерного направления, связанные с анализом прочности и износостойкости материалов и конструкций, методов лазерной и термической обработки изделий и их покрытий, сопровождения жизненного цикла установок и в ряде других направлений.

В докладе были рассмотрены проблемы, возможности и опыт решения фундаментальных и прикладных задач в области материаловедения методами суперкомпьютерного моделирования.

Приведены классы задач, актуальные для получения новых прорывных результатов и требующие применения суперкомпьютерных технологий моделирования (СКТМ):

- Определение свойств чистых веществ и перспективных композитных материалов в широком диапазоне термодинамических параметров, в том числе восстановление всего спектра свойств веществ и материалов на основе численного анализа молекулярных и квантово-механических моделей.

- Конструирование новых материалов, в том числе наноструктурированных органических и неорганических материалов с заданными свойствами, а также технологий их изготовления, на основе численного анализа широкого спектра математических моделей и применения методов оптимизации, управления, распознавания образов и искусственного интеллекта.

- Моделирование процессов механической, термической, химической и лазерной обработки материалов на микроуровне, в том числе:

- ударное и тепловое воздействие на поверхность материалов,
- травление поверхностей,
- лазерное плавление и спекание материалов,
- лазерное упрочнение поверхностей,
- лазерная резка микро- и наноматериалов,

- неразрушающий контроль качества материалов на всех стадиях обработки. В данном направлении наиболее эффективным оказывается комбинированный многомасштабный подход, сочетающий методы механики сплошных сред и методы частиц.

- Разработка микро- и наноразмерных механических, электронных, химических, биологических устройств, конструкций и систем на их основе. В данном классе может применяться весь аппарат математического и суперкомпьютерного моделирования.

- Решение задач разрушения материалов и конструкций, а также анализ их жизненного цикла с использованием информации об атомно-молекулярных и микроструктурных свойствах веществ также на основе широкого применения СКТМ.

Если говорить о том, что могут дать суперкомпьютерные технологии в вышеуказанных областях науки и инженерии, то важно отметить прежде всего новое высокое качество получаемых фундаментальных знаний и технических решений, инновационный характер разработок, существенное сокращение времени от идеи до реализации.

Вместе с тем, отметил докладчик, применение СКТМ имеет и определенные собственные проблемы. Среди них разработка новых подходов к составлению параллельных алгоритмов и пакетов системных и прикладных программ, создание систем массового доступа к суперкомпьютерному инструментарию, накопление получаемых

знаний и ноу-хау в объединенной национальной сети суперкомпьютерных центров (СКЦ) и центров обработки данных (ЦОД).

В докладе д.ф.-м.н. В.В. Стегайлова (презентация доклада представлена в Приложении 5) отмечено, что современные атомистические модели вещества основаны на фундаментальных теоретических представлениях о квантовой природе многоэлектронных систем, представляющих собой разнообразные проявления взаимодействий атомов, молекул, ионов и электронов. Основу современного вычислительного материаловедения составляют методы квантовой химии и методы физики твердого тела, с конца 1980гг. развивающиеся в неразрывной связи с появившимися в то же время суперкомпьютерами, обеспечивающими ускорение решения задач математического моделирования с помощью параллельных вычислений.

Современная иерархия атомистических методов позволяет переносить данные от квантово-механического уровня пикосекундного описания сотен и тысяч атомов к системам миллионов и миллиардов атомов и временам прямого моделирования до миллисекунд, что позволяет описывать такие процессы, как, например, разрушение конструкционных материалов, функционирование биомолекулярных систем и свойства полимерных композиционных материалов. Общность вычислительных методов решения такого широкого спектра задач позволяет с единых позиций формулировать требования к суперкомпьютерной инфраструктуре.

Неотъемлемым элементом развития научной базы для решения задач атомистического и многомасштабного моделирования является развитие параллельных open-source кодов, аккумулирующих опыт и разработки ведущих мировых научных коллективов. К настоящему времени в данной области математического моделирования сформировался набор программных инструментов для суперкомпьютерных расчетов, активно использующийся во всем мире. Важными стратегическими факторами планирования суперкомпьютерной инфраструктуры являются, с одной стороны, инерционность разработки подобных кодов и, с другой стороны, быстрая эволюция архитектуры микропроцессоров в пост-Муровскую эру. Примеры удач и неудач подобных эволюционных процессов будут приведены в докладе.

Подсчитано, что расчеты методами атомистического моделирования суммарно потребляют около 30% суперкомпьютерных ресурсов ведущих стран мира. Важным вопросом является описание типовых сценариев использования суперкомпьютеров в вычислительном материаловедении (и в математическом моделировании вообще). Во-первых, существует класс задач, решение которых принципиально невозможно без использования сверхбольших параллельных вычислительных систем (capability computing). Другой более приближенный к инженерной практике класс задач соответствует задачам оптимизации с перебором большого числа вариантов методами математического моделирования (high-throughput computing). Акцент на первом или на втором типе задач позволяет по-разному оптимизировать аппаратно-техническую суперкомпьютерную инфраструктуру. В докладе описаны сценарии применения в атомистическом моделировании сверхбольших суперкомпьютеров, суперкомпьютеров среднего уровня, ЦОДов, облачных ресурсов и методов распределенных вычислений.

Таким образом, показано, зачем в данной предметной области нужны суперкомпьютеры и каким требованиям они должны удовлетворять.

В докладе автор провел сравнение существующей сегодня в России суперкомпьютерной инфраструктуры с примерами из зарубежного опыта (первые попытки подобного сравнения были опубликованы 6 лет назад). На основе опыта работ

отдела автора последних 5 лет описаны возможности использования отечественной элементной базы для создания суперкомпьютеров мирового уровня.

Сообщение А.Э. Рязанцева было посвящено проблемам вычислительного материаловедения для задач оптимального проектирования» (презентация приведена в Приложении 6). Он отметил, что представляет на заседании Совета не только свой Центр, но и Сибирское отделение РАН, Институт теоретической и прикладной механики, научным руководителем которого является академик В.М. Фомин, и хотел бы коснуться вопросов, касающихся применения вычислительного материаловедения на уровне инженерных подходов, в рамках ряда проектов Центра. В ходе их выполнения было получено большое количество характеристик различных материалов с целью возможности проектирования изделий. Из этого родилась концепция цифрового паспорта материала, то есть некоего набора моделей, некоего набора данных, которые содержат в себе всеобъемлющие характеристики материала. Можно выделить следующую проблематику внедрения новых материалов.

Новые материалы имеют критическое значение для обеспечения конкурентоспособности экономики и обороноспособности страны. Лаг от открытия материала до его полноценного внедрения составляет более 20 лет. Огромные затраты на прохождение всего пути – долина смерти. Отсутствует интеграция между производителями изделий и разработчиками материала. Необходимо сократить путь от открытия материала до его внедрения до 5 лет.

Технические барьеры:

- Отсутствие данных о материале, достаточных для оценки характеристик будущей конструкции;
- Проектирование (CAD/CAM/CAE) – моделирование (FEM+) – цифровой двойник
- Отсутствие у разработчиков инициативы по внедрению новых материалов в свои конструкции;
- Устаревание используемых в настоящее время методов численного расчета композитных конструкций.

Инфраструктурные барьеры:

- Стоимость сертификации увеличивает сроки окупаемости проектов по разработке новых материалов;
- Прототипирование, спецквалификация, отработка тех. режимов
- Бюрократический подход госрегуляторов при работе с новыми материалами;
- Дефицит подготовленных кадров.

Для решения проблем необходим переход от выбора материала из списка существующих к интегрированной разработке материалов, соответствующих требованиям спецификации.

- Необходимо создание цифровых моделей материалов на основе их иерархической внутренней структуры
- Разрабатываемая Цифровая Платформа Вычислительного Материаловедения (CMP – computational material platform) должна взаимодействовать с PLM, умными фабриками и др. Матрица Т – конкретное состояние цифрового двойника технологического процесса.
- Важна количественная оценка неопределенности на всех множествах данных (экспериментальных и расчётных)
- Для реализации предложенного подхода необходима разработка онтологии и компьютерного языка формальных описаний микроструктуры, техпроцессов и эксплуатационных свойств
- Структуризация текущего опыта по решению мультидисциплинарных и многомасштабных задач математической физики и химии
- Применение современных методов анализа больших данных

В рамках последних конструкторских проектов Центра наблюдается переход от применения существующих материалов из перечня-ограничителя к разработке конкретного материала под конкретный проект. При этом решаются возникающие прямые и обратные задачи, под прямыми задачами имеются ввиду расчёты микроструктуры по технологическому процессу, задачи по расчётам деформационных свойств по микроструктуре, прямую задачу реакции конструкции на нагрузку при том или ином виде материала. Решается также комплекс обратных задач, возникающих в этом же цикле, и в этих случаях, конечно, мы подходим к суперкомпьютерному моделированию. Еще одна проблема, на которой необходимо остановиться – это проблема образования и инфраструктуры, поскольку в настоящее время высокопроизводительные компьютерные вычисления – проблема даже не научная, а инженерная, а в инженерной области, к сожалению, это проблема решается очень плохо. Специалистов-инженеров, готовых работать с суперкомпьютерными центрами, в частности в Академгородке, в суперкомпьютерном центре СО РАН, мало. К тому же все мощности суперкомпьютерного центра СО РАН законтрактованы на 3 года вперед на решение задач ядерной физики, генома, задачи 3D-сейсморазведки. Центр собирается инвестировать свои деньги на покупку и установку своих ядер в рамках суперкомпьютерного комплекса.

А.Э. Рязанцев завершил свой доклад следующими выводами.

Можно выделить основные факторы, увеличивающие требования к вычислительным мощностям для решения задач материаловедения:

- рост требований к точности расчета. Увеличение количества расчетных узлов;
- необходимость инженерного анализа неопределенности, устойчивости, чувствительности решения к вариации входных параметров (~1000 прямых задач);
- мультимасштабность. Учет микроструктуры;
- необходимость решать обратные задачи оптимизации материала, техпроцесса и конструкции;
- рост «связанности» задач.

Прежде несвязанные задачи разработки материала и конструкции становятся связанными относительно микроструктуры и техпроцесса. Выполняемые в настоящее время отдельно расчеты статической и ресурсной прочности, живучести также становятся связанными при решении задач оптимизации.

Выступление Д.С. Лаврищева «Проблемные вопросы вычислительного материаловедения»:

Развитие аппаратно-технического оснащения в суперкомпьютерной отрасли в России проходит в условиях отсутствия технических требований со стороны пользователей. При этом решаются задачи квантовой механики, физики твердого тела, проводятся в основном фундаментальные исследования. Кроме того, при математическом моделировании объектом исследований становятся не материалы, а вещества.

В то же время, наиболее актуальные задачи, требующие немедленного решения, в силу разных причин до сих пор не решены. Это задачи, связанные с разработкой математических моделей применительно к аддитивным технологиям, моделирование и прогнозирование физико-механических и теплофизических свойств композиционных материалов, моделирование разрушения материалов.

Следует отметить, что сейчас необходимо заниматься не только и не столько фундаментальными и поисковыми исследованиями, сколько конкретными прикладными задачами, от которых во многом зависит развитие современного материаловедения.

Вот некоторые важнейшие вопросы, которые необходимо решить в ближайшие 3-5 лет:

1. В настоящее время программное обеспечение для цифрового моделирования технологий, процессов создания материалов на этапах жизненного цикла заимствованы за рубежом (ANSYS, COSMOS, ABUCUS и др.). Необходимо создание национальных

российских программных кодов в области математического моделирования и решения задач численного и имитационного моделирования.

Одним из примеров разработки отечественного программного обеспечения является программный комплекс «ЛОГОС» под руководством руководителя приоритетного технологического направления "Технологии высокопроизводительных вычислений, включая суперкомпьютерные технологии" Рашита Мирзагалиевича Шагалиева для решения задач аэродинамики, тепломассопереноса, статической и динамической прочности.

Вместе с тем необходима адаптация данного программного продукта под архитектуру суперкомпьютеров, создание дополнительных модулей для моделирования и прогнозирования физико-механических свойств различных материалов, в первую очередь композиционных материалов на полимерных, металлических и керамических матрицах.

2. Первоочередной задачей является разработка математических моделей применительно к аддитивным технологиям, так как эта задача объединяет в себе решение задач физики твердого тела и моделирование процессов обработки материала.

По данной задаче необходима тесная кооперация математиков, программистов и материаловедов. Должны быть решены вопросы предоставления исходных данных, построения математических моделей, разработки алгоритмов программ для параллельных вычислений, проверки достоверности полученных данных, их верификация и валидация.

Об этом была соответствующая беседа академика Е.Н. Каблова с академиком В.В. Козловым, на которой обсуждались вопросы взаимодействия в этой области. Однако, сложная ситуация в 2020 году не позволила далее развить данную тему. Считаем целесообразным вернуться к рассмотрению вопроса в ближайшее время.

Крайне важной задачей является разработка программного обеспечения для аддитивного оборудования российского производства.

В соответствии с подписанным соглашением между Правительством РФ и ГК "Росатом" была разработана Дорожная карта «Технологии новых материалов и веществ», в рамках которой реализуются мероприятия Комплексного плана по развитию и внедрению аддитивных технологий в Российской Федерации". ГК "Росатом" отвечает за мероприятия, связанные с разработкой отечественного аддитивного оборудования и соответствующего ПО, при материаловедческом сопровождении со стороны ФГУП ВИАМ.

Создаваемый научный центр мирового уровня "Аддитивные технологии" ставит своими задачами проведение фундаментальных исследований в части установления базовых принципов формирования материалов с применением цифровых аддитивных технологий и разработку с применением математического моделирования нового поколения отечественных материалов и аддитивных технологий полного цикла изготовления ответственных деталей сложных технических систем с заданной структурой, физико-механическими свойствами и состоянием поверхности для авиационной, ракетно-космической, судостроительной, энергетической, нефтеперерабатывающей, атомной промышленности Российской Федерации. Считаем необходимым наиболее полно участвовать в работе этого НЦМУ институты РАН.

Примером такого успешного сотрудничества является проведенная во ФГУП ВИАМ работа по использованию цифровых технологий при разработке металлических и керамических композиционных материалов.

В рамках этой работы были решены 9 задач:

первый уровень - виртуальное моделирование структуры КМ:

1. Моделирование изменения структуры КМ при термомеханическом воздействии
 2. Моделирование формирования межфазного слоя
 3. Моделирование микро- и наномеханических параметров, определяющих свойства КМ
- второй уровень - виртуальное моделирование свойств КМ

4. Моделирование влияния температуры на свойства с учетом характеристик границы раздела фаз
5. Моделирование изменения КТР и теплопроводности в зависимости от температуры
6. Моделирование рационального армирования с учетом ориентации фаз
- третий уровень - применение расчетных моделей при разработке КМ
7. Структура КМ с учетом разработанных моделей
8. Верификация и валидация данных моделирования
9. Внесение полученных значений в базу данных

Предложенные подходы позволили реализовать принцип неразрывности "материал-технология-оборудование-конструкция" и сократить дорогостоящие эксперименты на этапе их опытной отработки путем реализации многоуровневого моделирования схем "конструкция- оборудование-условия эксплуатации-материал" и "условия эксплуатации-материал- оборудование-конструкция".

Совместно с ВЦ РАН было разработано отечественное ПО для прогноза оптимальных физико-механических и теплофизических свойств, в том числе при воздействии температур.

3. Одной из важнейшей задач вычислительного материаловедения является разработка математических моделей, описывающих поведение высокотемпературных материалов в ожидаемых условиях эксплуатации.

4. Крайне важной задачей является разработка математических моделей, описывающих и прогнозирующих разрушение полимерных и металлических КМ. По нашему опыту известно, что в настоящее время ни одна научная организация не берется за составление соответствующих алгоритмов расчета, была организована работа по данному направлению с СО РАН, однако положительный результат не был достигнут. Решение этой задачи имеет принципиально важное значение при разработке материалов нового поколения, прогнозирования их срока службы, а также их применения в составе конструкции изделия. В связи с этим считаем необходимым выполнение научных работ в названном направлении, с участием специалистов различных областей знания (материаловедов, химиков, программистов и математиков), при поддержке государственных научных фондов.

5. По поручению НТС ФГУП ВИАМ просит академика Б.Н. Четверушкина рассмотреть вопрос о совместной работе Института прикладной математики им. Келдыша и ФГУП ВИАМ в части проведения исследований в области математического моделирования материаловедческих процессов.

Заслушав и обсудив доклады, а также выступления членов Совета и приглашенных Научный Совет по материалам и наноматериалам решил:

Продолжить цикл заседаний, посвященных задачам и вопросам моделирования материалов и их свойств и процессов с их участием, акцентируя внимание на методах решения научно-прикладных и инженерных задач, связанных, как отмечено выше:

- с предсказанием и изготовлением новых материалов и конструкций,
- анализом их прочности и износостойкости,
- сопровождением жизненного цикла изделий и их безопасной утилизации;
- с разработкой математических моделей применительно к аддитивным технологиям,
- с разработкой и применением атомистических моделей материалов и отдельных химических соединений с заданными свойствами, в том числе биологически активных соединений;
- с моделированием атомистическими методами поведения сложных полимерных, биополимерных и гибридных систем в ДНК-нанотехнологии и фармакологии
- с моделированием и прогнозированием физико-механических и теплофизических свойств композиционных материалов;

- с моделированием деградации свойств материалов со временем в процессе хранения и эксплуатации;
- с применением методов искусственного интеллекта для предсказания новых материалов с заранее заданными свойствами;
- с разработкой концепции профильного вычислительного центра для комплексного решения проблем создания новых материалов.

В итоге сформулировать решение Совета по обсуждаемой проблеме моделирования материалов и их свойств и процессов с их участием.

Следующее заседание, посвященное **моделированию материалов и их свойств и процессов с их участием**, прошло 18 ноября в режиме ВКС со следующей повесткой.

1. Вступительное слово председателя Научного совета РАН, академика Сергея Михайловича Алдошина.
2. Доклад профессора Сколковского института науки и технологий, д. ф.-м.н., Habilitation, PhD, профессора РАН Артема Ромаевича Оганова «Предсказание новых материалов и необычных веществ при помощи искусственного интеллекта».



3. Доклад Первого заместителя генерального директора АО «Наука и инновации» ГК "Росатом", д.т.н., профессора Алексея Владимировича Дуба «Развитие компьютерного материаловедения для отбора кандидатных материалов перспективных ядерных технологий».



4. Сообщение директора НИВЦ МГУ член-корр. РАН Владимира Валентиновича Воеводина «Суперкомпьютерный комплекс МГУ и задачи материаловедения».



5. Сообщение директора МИЦ "Композиты России" МГТУ им. Н.Э. Баумана к.т.н., доцента Владимира Александровича Нелюба «Цифровое материаловедение. Опыт МГТУ им. Н.Э. Баумана в моделировании и создании новых конструкционных и функциональных материалов с заданными свойствами».
- 6.



7. Обсуждение, принятие решений

Доклад профессора Сколковского института науки и технологий, д.ф.-м.н., Habilitation, PhD, профессора РАН Артема Ромаевича Оганова «Предсказание новых материалов и необычных веществ при помощи искусственного интеллекта».

В последние 10 лет появилась возможность предсказывать новые материалы с требуемыми свойствами. Это обусловлено как ростом вычислительных ресурсов, так и - в большей мере - ростом точности квантовомеханических расчетов и возникновением новых алгоритмов глобальной оптимизации и машинного обучения. Эти методы уже получили применение в широком спектре научных дисциплин от материаловедения до структурной химии, геологии, молекулярной биологии, фармакологии.

В докладе представлены некоторые передовые работы и методы, создаваемые в этих направлениях российскими учеными. Упомянуты российские программные коды, широко используемые во всем мире для решения задач теоретического материаловедения - USPEX (А.Р. Оганов), TOPOSPRO (В.А. Блатов), MLIP (А.В. Шاپеев), AMULET (В.И. Анисимов), и частично российские ABINIT (К. Гонз), FHI-aims (российский соавтор - С.В. Левченко)

В докладе А.В. Дуба «Развитие компьютерного материаловедения для отбора кандидатных материалов перспективных ядерных технологий» отмечено, что суперкомпьютерные технологии и компьютерное материаловедение становятся неотъемлемой частью не только фундаментальных исследований, но и прикладных разработок.

В Госкорпорации «Росатом» в рамках Единого отраслевого тематического плана НИОКР это направление развивается в области разработки методик отбора кандидатных материалов для перспективных реакторных установок. Направление включает в себя

разработку моделей и программ для прогноза эволюции материалов по ключевым механизмам деградации при облучении: набухание, фазовый распад, коррозия при взаимодействии с теплоносителем и топливом, радиационная ползучесть.

Основой разработок является многомасштабное моделирование происходящих в материале процессов с целью максимально учесть сложную картину явлений, происходящих при облучении материалов. Многомасштабность включает как методы атомистического моделирования (квантово-механические расчёты, метод молекулярной динамики), так и крупномасштабные методы для выхода на пространственные и временные масштабы функционирования материалов в реакторе.

На сегодняшний день достигнутые результаты позволяют помочь понять не только механизмы происходящих явлений в материалах при облучении, но и прогнозировать эволюцию их свойств.

Синергетическую роль в компьютерном материаловедении играет направление информатики материалов, связанной с поиском закономерностей состав – структура – свойство. Информатика материалов машинным образом воспроизводит накопление и аккумулирование опыта на основе уже полученных экспериментальных данных. Для этого в Госкорпорации «Росатом» создается база данных по свойствам материалов, на основе которой методами машинного обучения проводится поиск корреляций состав – структура – свойство, что используется при дальнейшем скрининге и дизайне новых материалов.

В качестве примера применения машинного обучения для разработки материалов можно привести результаты высокопроизводительного компьютерного моделирования и анализа свойств многокомпонентных ферритных сплавов на основе системы Fe-Cr. Используя выборку из 185 сплавов удалось обучить нейронную сеть разрабатывать предложения по улучшению используемых сплавов. Для оптимизации химического состава с целью улучшения модуля упругости методами машинного обучения были сгенерированы 556 578 сплавов, и для них были посчитаны признаки значимости результатов с точки зрения вычислительной машины. Используя заранее обученную модель нейронной сети были предсказаны величины модуля Юнга, энергии смещения и соотношения G/B для всех новых сгенерированных сплавов. При этом максимальный модуль Юнга составил 270 ГПа, что оказалось заметно выше максимального значения 235 ГПа в исходной обучаемой выборке. Далее из сгенерированных 556 578 сплавов были отобраны термодинамически стабильные сплавы ($\Delta H_{mix} < 0$) и сплавы с соотношением $G/B < 0,5$. После этих критериев набор ограничился 246 330 сплавами, и уже в этом наборе максимальный предсказанный модуль Юнга составил 253 ГПа. В исходном наборе (185 сплавов) после применения критериев $\Delta H_{mix} < 0$ и $G/B < 0,5$ максимальный модуль Юнга составил 223 ГПа, т.е. методом машинного обучения были предсказаны сплавы с модулем упругости выше на 30 ГПа, чем в обучаемой выборке. При этом стоит отметить, что обучаемая выборка ограничивалась только четырехкомпонентными твердыми растворами, а использование метода машинного обучения позволило оценить параметры E , ΔH_{mix} и G/B вплоть до восьмикомпонентных сплавов.

На текущий момент основными критериями отбора кандидатных материалов, используемых в условиях радиационного воздействия, являются скорость набухания, кратковременные и длительные прочностные свойства. Наряду с многокомпонентностью систем задачу разработки оптимальных кандидатных сплавов возможно решить только с использованием машинных методов обучения.

В своем сообщении «Суперкомпьютерный комплекс МГУ и задачи материаловедения» В.В. Воеводин отметил, что вычислительные технологии используются в современной науке очень широко. Это в полной мере относится и к высокопроизводительным вычислительным технологиям, однако в этом случае на передний план выходят два нюанса. С одной стороны, это растущие потенциальные

возможности суперкомпьютеров, что, безусловно, привлекает множество исследователей по всему миру. Но вместе с этим, это и постоянно меняющаяся и усложняющаяся архитектура вычислительных систем, что делает использование их потенциала специалистами в конкретных предметных областях не самым простым делом. Возможности суперкомпьютеров огромны, а воспользоваться ими в полной мере удастся далеко не всегда. Возникло понятие “суперкомпьютерного кодизайна”, которое нацелено на решение задачи согласования структуры алгоритмов с особенностями архитектуры. Но на практике этого мало, для успешного выполнения реальных проектов в суперкомпьютерных центрах необходимо решить и целый ряд организационных вопросов. Как организовать эффективное решение классов задач, в частности, задач материаловедения, в суперкомпьютерном комплексе МГУ, это и является предметом сообщения.

В.А. Нелюб в сообщении «Цифровое материаловедение. Опыт МГТУ им. Н.Э. Баумана в моделировании и создании новых конструкционных и функциональных материалов с заданными свойствами» подчеркнул, что взрывной рост вычислительных мощностей, появившиеся технологии обработки больших данных, искусственный интеллект открывают безграничные возможности для материаловедения. Цифровизация науки и производства должна объединить методы фундаментального материаловедения с помощью суперкомпьютерного моделирования, создания баз данных, инженерного программного обеспечения, автоматизацию производственных и эксплуатационных процессов и цикл вторичной переработки в единую систему цифрового материаловедения.

Важнейшими вопросами, которые необходимо решить в ближайшее время с использованием современных цифровых технологий, являются:

- разработка математических моделей применительно к современным технологиям производства и обработки материалов и их интеграция с существующими и разрабатываемыми комплексами инженерного программного обеспечения;
- разработка цифровых паспортов материалов, в том числе полимерных и металлических композиционных материалов в течение их полного жизненного цикла;
- создание цифровых баз данных и технологий их обработки, в том числе на основе искусственного интеллекта.

В МГТУ имени Н.Э. Баумана накоплен значительный опыт применения цифровых подходов для решения инженерных задач по разработке следующих конструкторско-технологических решений. Например, композитные лопасти и винты для беспилотных летательных аппаратов, гребные валы, пространственные размеростабильные конструкции для космических аппаратов, вентиляторные лопасти для турбин, радиопоглощающие и радиоотражающие композитные конструкции, рефлекторы для межспутниковой связи, железнодорожные аппарели, мобильное дорожное покрытие, корпусные элементы манипуляторов и многие другие.

В качестве примера использования в МИЦ «Композиты России» МГТУ им. Н.Э. Баумана новых методик цифрового моделирования рассмотрим решение задачи по разработке высокоэффективных технологий для создания многофункциональных композитов, обладающих высокой сдвиговой прочностью, стойкостью к воздействию молний и экранирующими свойствами в заданном диапазоне волн. Эта задача была последовательно решена путем разработки методики оценки модуля адгезионной связи, разработки моделей волокнистого композита и создания автоматизированной системы проектирования композитных конструкций. Созданные модели волокнистого композита учитывают адгезионное взаимодействие в системе волокно-матрица и позволяют определять толщину граничного слоя. Эти модели составили основу комплекса автоматизированного проектирования APM WinMachine Composite Materials, который мы используем в качестве прикладного аппарата для инженерных расчетов. Ядром комплекса являются модули AMP StructFEM, APM Civil Engineering, APM MultiPhysics.

Использование комплекса автоматизированного проектирования позволяет оптимизировать реологические свойства связующих и определять оптимальные значения характеристик используемых материалов. В итоге был разработан эффективный метод управления свойствами композитов путем нанесения на поверхность углеродных лент металлических покрытий заданной толщины и природы и разработаны технологии создания многофункциональных материалов на основе органических и неорганических матриц. Данное техническое решение было использовано при разработке ремонтных технологий, прежде всего в условиях отрицательных температур. Предложенные модели позволили в короткие сроки разработать технологию изготовления ремонтных бандажей, которая позволяет восстанавливать ресурс нефтепровода, способствует снижению потерь тепла при транспортировке нефти и одновременно повышает адгезию бандажа к поврежденному металлическому трубопроводу.

Создание цифровых баз данных по материалам и технологиям их переработке на основе искусственного интеллекта и интеграции с соответствующими модулями инженерного программного обеспечения позволит успешно решать сложные инженерные задачи и содействовать в выполнении Дорожной карты «Новые материалы и вещества».

После обсуждения докладов и общей дискуссии по итогам двух прошедших заседаний Научный Совет по материалам и наноматериалам вынес следующее решение, которое является объединяющим для заседаний, посвященных проблемам моделирования материалов и их свойств и процессов с их участием.

Фундаментальные и прикладные проблемы материаловедения были и остаются одним из главных направлений развития науки, техники и технологий во всем мире. В последнее время это связано с широким внедрением нанотехнологий и нанобиотехнологий в промышленности, а еще больше с появившейся возможностью предсказывать и затем реализовывать новые материалы, намного превосходящие те материалы, которые используются ныне. Также появились новые вызовы стратегического характера, определяющие развитие высокотехнологичных отраслей хозяйства и социальной сферы на многие десятилетия вперед.

Необходимо постоянное развитие этой отрасли знания, которая все более обращается к методам математического и компьютерного моделирования. Последнее невозможно без использования современных суперкомпьютерных технологий моделирования (СКТМ).

Использование СКТМ стало необходимым требованием практически всех масштабных исследований свойств материалов нового поколения. На него опираются многие методы решения инженерных задач, связанные с предсказанием и изготовлением материалов и сложных технических систем, анализом их прочности и износостойкости, технологиями лазерной и термической обработки полуфабрикатов, изделий и покрытий, сопровождением жизненного цикла изделий и их безопасной утилизации.

СКТМ широко применяется в биоинженерии, молекулярной биологии, молекулярной и нано- медицине, а также при разработке лекарств. Атомистическое предсказание новых соединений и материалов, а также моделирование их свойств и поведения, включающее, в том числе, молекулярную динамику, квантовую химию и докинг, невозможно без использования суперкомпьютерных вычислительных мощностей.

Важнейшими вопросами, которые необходимо решить в ближайшее время, в части решения инженерных задач с использованием СКТМ, являются:

- создание национальных российских программных кодов в области математического моделирования, решения задач численного и имитационного моделирования, интеграция с существующими и разрабатываемыми комплексами инженерного программного обеспечения;
- разработка математических моделей применительно к современным технологиям производства и обработки материалов, в том числе аддитивным технологиям, при этом

должны быть решены вопросы предоставления исходных данных, построения математических моделей, разработки алгоритмов программ для параллельных вычислений, проверки достоверности полученных данных, их верификация и валидация;

- разработка математических моделей и цифровых паспортов, описывающих свойства новых материалов и веществ, в том числе полный жизненный цикл материалов включая поведение в условиях эксплуатации, что имеет принципиально важное значение для прогнозирования их срока службы, а также их применения в составе конструкции изделия. Необходимо выполнение научных работ в названном направлении, с участием специалистов различных областей знания (материаловедов, химиков, программистов и математиков), при поддержке государственных научных фондов;

- создание цифровых баз данных и технологий их обработки на основе искусственного интеллекта, свойств материалов и технологий их переработки и интеграции с соответствующими модулями инженерного программного обеспечения

СКТМ могут обеспечить:

- новое высокое качество получаемых фундаментальных знаний и технических решений на основе использования комплекса математических моделей, параллельной обработки данных, использования технологий искусственного интеллекта.

- существенное сокращение времени исследований (от фундаментальной идеи до практической реализации) за счет использования ресурсов научных центров коллективного пользования (НЦКП) и промышленных центров обработки данных (ПЦОД).

- быстрое внедрение получаемых знаний в конкретные технические и технологические решения за счет интеграции методов СКТМ в производственный цикл изделий.

- исключение/минимизация контакта персонала с потенциально опасными для здоровья материалами на этапе их разработки и выработка рекомендаций по их безопасному производству, хранению и утилизации с целью защиты окружающей среды.

В системе РАН и Минобрнауки РФ имеется множество организаций, так или иначе связанных с решением проблем материаловедения, с разработкой новых материалов и химических соединений с заданными свойствами. Ими накоплен большой опыт в области материаловедения и смежных отраслях знания. В этом контексте необходимо отметить фундаментальные работы Институтов из Отделения химии и наук о материалах РАН, Отделений физических и математических наук РАН, а также работы ОИВТ РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Физического института имени П.Н. Лебедева, Института вычислительных технологий СО РАН, Института физики металлов РАН, ИПЛИТ РАН, факультетов Химического, Физического и Биоинженерии и Биоинформатики, Института механики, НИИ Ядерной физики имени Д.В. Скобельцына и НИИЦ МГУ имени М.В. Ломоносова, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Московского энергетического института, Московского физико-технического института, Московского института стали и сплавов, Самарского технологического университета, Сколтеха, и др.

Среди отраслевых научных организаций нужно выделить ГК «Росатом», который в рамках Соглашения с Правительством РФ, формирует и реализует Дорожную карту «Новые материалы и вещества» и осуществляет долгосрочную широкомасштабную комплексную программу по исследованию материалов с привлечением таких, входящих в него научных центров как РФЯЦ-ВНИИТФ, РФЯЦ-ВНИИЭФ, ВНИИА, ЦНИИТМАШ и др., а также НИЦ Курчатовский институт и входящие в него институты.

Координация работ РАН, ГК «Росатом» и ведущих университетов играет важную роль в оптимизации затрат и «разделении труда» для скорейшего достижения поставленных целей.

На основании вышеотмеченного, а также на основании заслушанных докладов и их обсуждения Научный совет РАН по материалам и наноматериалам считает необходимым:

- - создание консорциума по разработке межотраслевой программы развития СКТМ для решения задач математического и компьютерного моделирования материалов и их применения в составе изделий, объединяющего академическую, вузовскую и отраслевую науку, промышленность и бизнес-компании;

- -разработку Комплексной научно-технической программы (КНТП) в области материаловедения с использованием суперкомпьютерных технологий моделирования материалов и их свойств. Эта программа будет опираться на суперкомпьютерные технологии моделирования материалов и их свойств, на методы искусственного интеллекта, с использованием различных пространственных и временных масштабов, и будет спланирована на период до 2030 г.;

- - создание суперкомпьютерного центра производительностью не менее 20 Pflors в интересах обеспечения организаций консорциума современной высокопроизводительной техникой для решения задач математического и компьютерного моделирования материалов;

- - инициировать создание пятилетнего плана модернизации суперкомпьютерных центров для поэтапного создания в России нескольких суперкомпьютеров с производительностью диапазонов от 0.5 до 1 ПФлопс, от 5 до 10 ПФлопс и от 50 до 100 ПФлопс в зависимости от специфики и объемов задач СКТМ как в области материаловедения, так и в иных областях науки и техники.

- -создание и долгосрочную поддержку национальных российских программных кодов и цифровых паспортов в области математического моделирования и решения задач численного и имитационного моделирования и интеграция с существующими и разрабатываемыми комплексами инженерного программного обеспечения;

- создание концепции и организации наполнения национального банка и баз знаний по материалам и их цифровым двойникам и обработки на основе искусственного интеллекта, свойств материалов и технологий их переработки и интеграции с соответствующими модулями инженерного программного обеспечения;

- - на основании объединения и координации компетенций организаций консорциума усилить подготовку кадров в профильных вузах в области суперкомпьютерных технологий моделирования задач материаловедения. Этой цели будет также помогать проведение стажировок и ежегодной конференции с элементами научной школы. Поддержка программ мобильности (стипендии для молодых ученых из РФ для прохождения стажировок в передовых центрах мировой науки, а также гранты для среднесрочных визитов мировых научных лидеров в РФ).

- -поддержку разработки, коммерциализации и популяризации (через вебинары и тд) существующих отечественных программ для дизайна материалов и баз данных.

РЕЗУЛЬТАТЫ,
ПОЛУЧЕННЫЕ в 2020 г.
ПО НАПРАВЛЕНИЮ РАБОТЫ
НАУЧНОГО СОВЕТА РАН
ПО МАТЕРИАЛАМ
И НАНОМАТЕРИАЛАМ

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ КЛАСТЕРОВ СМЕШАННОЙ ВАЛЕНТНОСТИ С ДВОЙНЫМ ОБМЕНОМ В КАЧЕСТВЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЯЧЕЕК ДЛЯ КВАНТОВЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

А.В. Палий, С.М. Алдошин, А.Д. Рыбаков, Х.М. Кlemente-Хуан, Б.С. Цукерблат
Институт проблем химической физики РАН

Работа посвящена исследованию возможности использования многоэлектронных димеров смешанной валентности (СВ) типа d^n-d^{n+1} ($1 \leq n \leq 8$) в качестве полуячеек формирующих квадратно-плоскостные ячейки молекулярных квантовых клеточных автоматов (ККА). Такие димеры содержат мобильный «лишний» электрон и два спиновых остова, представляющих собой парамагнитные высокоспиновые ионы d^n - типа. Была детально проанализирована как свободная (изолированная) ячейка такого типа, так и «рабочая ячейка», на которую действует квадрупольное кулоновское поле «управляющей ячейки». Был учтен тот факт, что в процессе межцентрового переноса лишний электрон поляризует спиновые остовы приводя к появлению ферромагнитного двойного обмена.

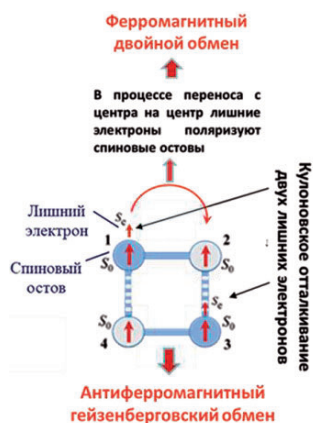
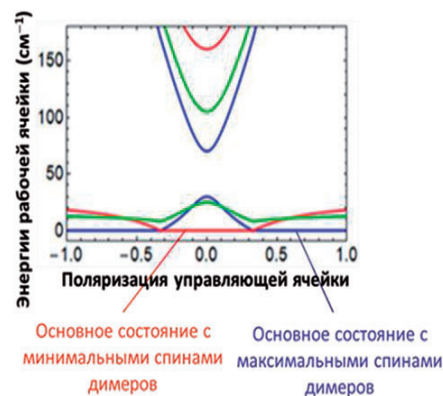


*Иллюстрация модели
свободной ячейки*



*Пример рассчитанного спинового
переключения в рабочей ячейке
под действием кулоновского поля
управляющей ячейки*

Также в развитой модели учитывались антиферромагнитный гейзенберговский обмен в димерных полуячейках, кулоновское отталкивание между двумя лишними электронами, и взаимодействие этих электронов с кулоновским полем, создаваемым поляризованной управляющей ячейкой. Проведенное исследование показало, что в зависимости от соотношения между параметрами эффективного (частично подавленного кулоновским взаимодействием внутри ячейки) двойного обмена и гейзенберговского обмена, основное состояние свободной ячейки может характеризоваться либо минимальными, либо максимальными значениями спинов, формирующих ячейку димеров. Было также показано, что кулоновское поле, создаваемое управляющей ячейкой, приводит к появлению дополнительного антиферромагнитного эффекта, а именно, это поле стремится подавить эффективный ферромагнитный двойной обмен и при определенных условиях оно способно вызвать переключение из состояния с максимальными значениями спинов димеров в состояние с минимальными значениями спинов. Такое спиновое переключение приводит к немонотонному поведению функции отклика «ячейка-ячейка». На основе полученных результатов был сделан вывод о возможности создания нанoeлектронных устройств, сочетающих в себе функцию ККА с дополнительной полезной функцией спинового переключения.

1. Palii A., Clemente-Juan J. M., Rybakov A., Aldoshin S., Tsukerblat B., Exploration of the double exchange in quantum cellular automata: proposal for a new class of cells // Chemical Communications 2020, Vol. 56, No. 73, P. 10682-10685.

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЕ ПЕРОВСКИТНЫЕ СОЛНЕЧНЫЕ БАТАРЕИ С ВЫСОКОЙ ЭКСПЛУАТАЦИОННОЙ И РАДИАЦИОННОЙ СТАБИЛЬНОСТЬЮ

А.Ф. Акбулатов, А.Г. Болдырева, О.Р. Ямилова, М.А. Теплякова, Л.Г. Гуцев,

Л.А. Фролова, С.Ю. Лучкин, С.М. Алдошин, П.А. Трошин

Институт проблем химической физики РАН,

Сколковский институт науки и технологий

В последние годы разработка солнечных элементов на основе комплексных галогенидов свинца с перовскитной структурой вызывает огромный интерес исследователей во всем мире ввиду их дешевизны, простоты изготовления и высоких к.п.д. преобразования света ($>25.5\%$ для лучших лабораторных образцов), что близко к рекордным показателям для кристаллического кремния ($\sim 26\%$). Несмотря на достигнутые успехи, практическое внедрение перовскитной фотовольтаики осложнено коротким сроком службы таких устройств. Это связано с низкой эксплуатационной стабильностью под действием электрического поля, повышенных температур, а также облучения светом.

Для разработки эффективных подходов к повышению стабильности перовскитных солнечных батарей были изучены механизмы их деградации их ключевых компонентов под действием различных повреждающих факторов. В частности, исследование электрохимической стабильности классического перовскитного материала MAPbI_3 позволило установить, что ключевым механизмом деградации материала является окисление анионов I^- с образованием полийодидов и восстановление органического катиона CH_3NH_3^+ до газообразных продуктов [1].

Впервые установлены пути фотохимической и термической деградации перовскитных материалов на основе комплексных галогенидов свинца APbX_3 и олова ASnX_3 ($\text{A}=\text{MA}, \text{FA}, \text{Cs}$; $\text{X}=\text{Br}, \text{I}$) [2-4]. Показано, что все гибридные материалы с органическими катионами претерпевают быстрое разложение под действием повышенных температур и света даже в отсутствии кислорода и влаги воздуха. При этом первой стадией терморазложения APbX_3 является образование солей PbX_2 и AX , а последующий термолит приводит к формированию множества летучих продуктов.

Проведены первые систематические исследования влияния ионизирующего излучения на стабильность различных типов комплексных галогенидов свинца и солнечных батарей на их основе [5, 6]. Обнаружено, что гамма-лучи вызывают разделение фаз в системах, содержащих два различных галогенид иона (например, $\text{Cs}_{0.15}\text{MA}_{0.10}\text{FA}_{0.75}\text{Pb}(\text{Br}_{0.17}\text{I}_{0.83})_3$), что делает более перспективным исследование комплексных йодидов без модификации бромом. Напротив, наилучшую стабильность показали системы, содержащие катионы CH_3NH_3^+ и анионы I^- , которые легко образуют летучие продукты радиолитического распада CH_3I и NH_3 . Эти небольшие молекулы могут мигрировать в перовскитной кристаллической решетке, вновь соединяться с образованием $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$, который в реакции с PbI_2 регенерирует исходный комплексный галогенид свинца $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (MAPbI_3). Таким образом, эта совокупность реакций обеспечивает заживление дефектов, образующихся в материале под действием ионизирующего излучения, обеспечивая беспрецедентно высокую радиационную стабильности перовскитной системы MAPbI_3 .

Мы предложили эффективный подход к повышению эффективности и стабильности перовскитных солнечных батарей за счет использования модификаторов на основе

поливинилкарбазола [7]. Логическим продолжением этой работы стало изучение влияния модельных зарядово-транспортных материалов на стабильность комплексных галогенидов свинца в тонких пленках и в структуре солнечных батарей. Установлены механизмы протекающих межслоевых фотохимических процессов [8]. На основе полученных данных был предложен новый гибридный дырочно-транспортный слой на основе комбинации полимерного и оксидного материалов (PTAA/ VO_x), обеспечивающий эффективность перовскитных солнечных батарей до 20% и стабильную работу в течение более 4500 часов (рис. 1) [9].

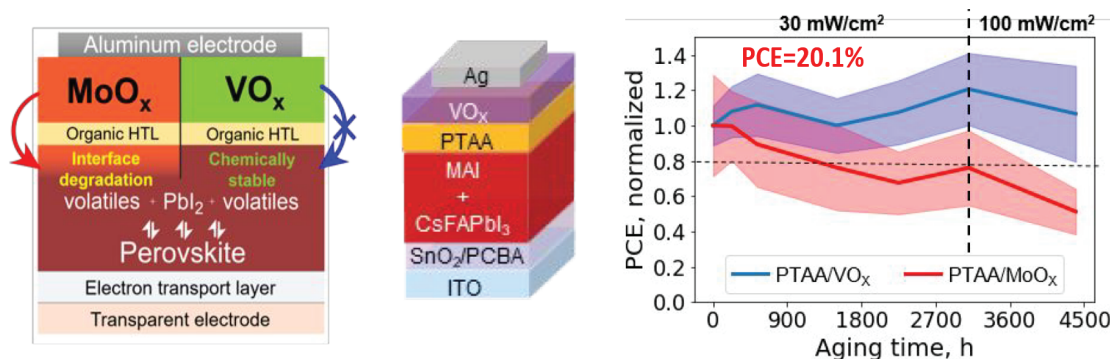


Рис. 1. Иллюстрация механизма, объясняющего высокую стабильность солнечных батарей с дырочно-транспортным слоем на основе комбинации PTAA/ VO_x (слева), структура солнечного элемента (по центру), а также относительное изменение эффективности солнечных батарей с дырочно-транспортными слоями на основе PTAA/ MoO_x и PTAA/ VO_x (справа).

Этот результат является одним из лучших в мировой литературе на сегодняшний день. Имеется значительный потенциал дальнейшего развития предложенных подходов и практического внедрения созданных разработок.

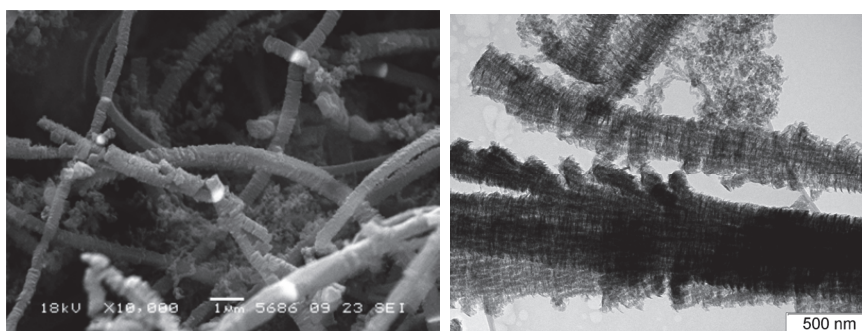
1. O.R. Yamilova, A.V. Danilov, M. Mangrulkar, Y.S. Fedotov, S.Y. Luchkin, S.D. Babenko, S.I. Bredikhin, S.M. Aldoshin, K.J. Stevenson and P.A. Troshin, Reduction of Methylammonium Cations as a Major Electrochemical Degradation Pathway in MAPbI_3 Perovskite Solar Cells. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2020, 11, 221–228
2. A.F. Akbulatov, L.A. Frolova, N.N. Dremova, I. Zhidkov, V.M. Martynenko, S.A. Tsarev, S.Y. Luchkin, E.Z. Kurmaev, S.M. Aldoshin, K.J. Stevenson and P.A. Troshin, Light or Heat: What Is Killing Lead Halide Perovskites under Solar Cell Operation Conditions? *J. Phys. Chem. Lett.*, 2020, 11, 333–339
3. A.F. Akbulatov, V.M. Martynenko, L.A. Frolova, N.N. Dremova, I. Zhidkov, S.A. Tsarev, S.Y. Luchkin, E.Z. Kurmaev, S.M. Aldoshin, K.J. Stevenson and P. A. Troshin, Intrinsic thermal decomposition pathways of lead halide perovskites APbX_3 . *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 2020, 213, 110559
4. A.F. Akbulatov, S.A. Tsarev, M. Elshobaki, S.Y. Luchkin, I.S. Zhidkov, E.Z. Kurmaev, S.M. Aldoshin, K.J. Stevenson and P.A. Troshin. Comparative Intrinsic Thermal and Photochemical Stability of Sn(II) Complex Halides as Next-Generation Materials for Lead-Free Perovskite Solar Cells. *J. Phys. Chem. C*, 2019, 123, 26862–26869
5. A.G. Boldyreva, A.F. Akbulatov, S.A. Tsarev, S.Yu. Luchkin, I.S. Zhidkov, E.Z. Kurmaev, K. J. Stevenson, V. G. Petrov, P. A. Troshin. Gamma Rays Induced Halide Phase Segregation in the Triple-Cation Perovskite Solar Cells. *J. Phys. Chem. Lett.* 2019, 10, 813–818

6. A.G. Boldyreva, L.A. Frolova, I.S. Zhidkov, L.G. Gutsev, E.Z. Kurmaev, B.R. Ramachandran, V.G. Petrov, K.J. Stevenson, S.M. Aldoshin, and P.A. Troshin. Unravelling the Material Composition Effects on the Gamma Ray Stability of Lead Halide Perovskite Solar Cells: MAPbI₃ breaks the records. *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, 11, 7, 2630–2636
7. L.A. Frolova, A.I. Davlethanov, N.N. Dremova, I. Zhidkov, A.F. Akbulatov, E.Z. Kurmaev, S.M. Aldoshin, K.J. Stevenson and P.A. Troshin, Efficient and Stable MAPbI₃-Based Perovskite Solar Cells Using Polyvinylcarbazole Passivation. *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, 11, 6772–6778
8. A.G. Boldyreva, A.F. Akbulatov, M. Elnaggar, S.Yu. Luchkin, A.V. Danilov, I.S. Zhidkov, O.R. Yamilova, Yu.S. Fedotov, S.I. Bredikhin, E.Z. Kurmaev, K.J. Stevenson, and P.A. Troshin. Impact of charge transport layers on photochemical stability of MAPbI₃ in thin films and perovskite solar cells. *Sust. Energ. Fuels*, 2019, 3, 2705-2716
9. M.M. Tepliakova, A.N. Mikheeva, L.A. Frolova, A.G. Boldyreva, A. Elakshar, A.V. Novikov, S.A. Tsarev, M.I. Ustinova, O.R. Yamilova, A.G. Nasibulin, S.M. Aldoshin, K.J. Stevenson and P.A. Troshin. Incorporation of Vanadium (V) Oxide in Hybrid Hole Transport Layer Enables Long-term Operational Stability of Perovskite Solar Cells. *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, 11, 14, 5563–5568

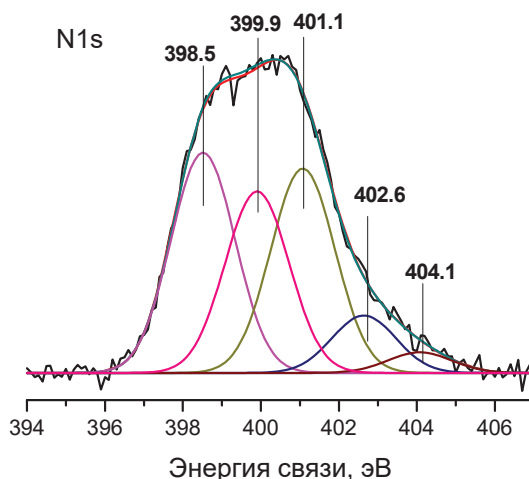
ПОЛУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА САМООРГАНИЗУЮЩИХСЯ КАТАЛИЗАТОРАХ Ni -M

И.В. Мишаков, Ю.И. Бауман, В.О. Стояновский, Л.С. Кибис, А.А. Ведягин
*Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук»*

Проведена *in-situ* функционализация углеродных волокон путём совместного каталитического пиролиза хлорзамещенных углеводородов и О- и N-содержащих субстратов на самоорганизующихся катализаторах Ni-M. Впервые удалось синтезировать углеродные нити сегментированной структуры, содержащие ~2 мас.% азота, встроенного в структуру графеновых слоев. Полученный материал N-УНВ имеет однородную структуру и очень развитую удельную поверхность (470 м²/г).



Снимки электронной микроскопии углеродного материала, полученного на сплаве Ni-Pd путём разложения реакционной смеси C₂H₄Cl₂/Ar/H₂ + CH₃CN



Спектр N1s с разложением на индивидуальные компоненты для образца, полученного в результате каталитического пиролиза смеси $\{C_2H_4Cl_2/Ar/H_2+CH_3CN\}$

1. A.A. Popov, Y.V. Shubin, Y.I. Bauman, P.E. Plyusnin I.V., Mishakov, M.R. Sharafutdinov, E.A. Maximovskii, S.V. Korenev, A.A. Vedyagin. Preparation of Porous Co-Pt Alloys for Catalytic Synthesis of Carbon Nanofibers. // Nanotechnology. 2020. V.31. N49. 495604:1-11. DOI: 10.1088/1361-6528/abb430
2. I.V. Mishakov, Y.I. Bauman, Y.V. Shubin L.S., Kibis, E.Y. Gerasimov, M.S. Mel'gunov, V.O. Stoyanovskii, S.V. Korenev, A.A. Vedyagin. Synthesis of Nitrogen Doped Segmented Carbon Nanofibers via Metal Dusting of Ni-Pd // Alloy Catalysis Today. 2020. DOI: 10.1016/j.cattod.2020.06.024

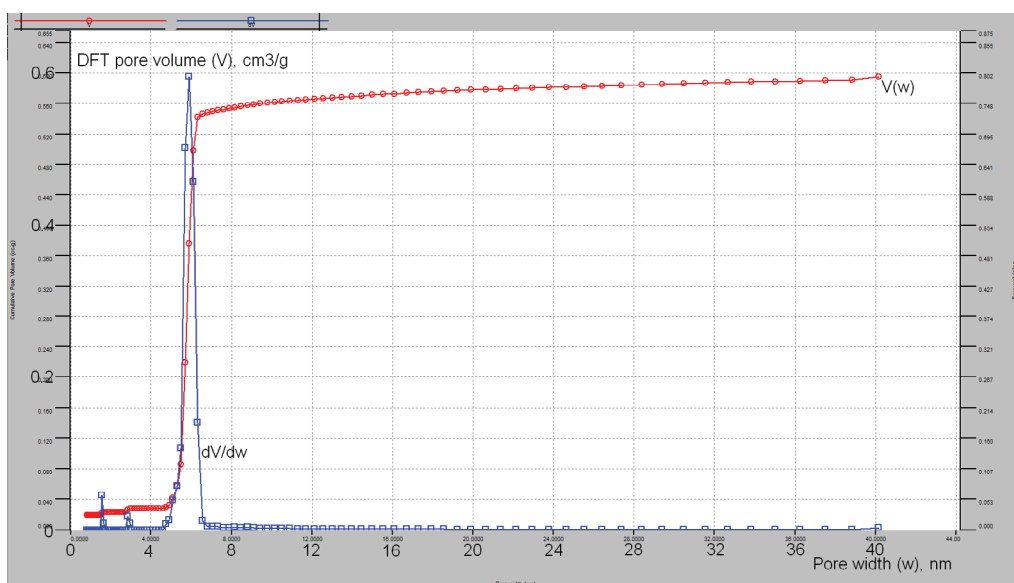
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ОКСИДА ГРАФЕНА *Тамбовский государственный технический университет*

Оксид графена и его модифицированные формы обладают наиболее разнообразными возможностями для и применения в технике. Это химические источники тока, адсорбенты для вредных органических веществ, соединений тяжелых металлов, радионуклидов, графеновые аэрогели, адсорбенты для медицины и сельского хозяйства, обеспечивающие пролонгированное действие биологически активных веществ, коррозионно-стойкие и огнестойкие лакокрасочные покрытия, покрытия, обладающие способностью поглощать электромагнитное излучение, и многое другое. Все эти применения становятся возможными при условии создания относительно недорогой и масштабируемой технологии производства оксида графена. На рисунке показан участок производства оксида графена в ООО НаноТехЦентр (Тамбов). Технология запатентована [1]. В настоящее время производительность соответствует переработке 0,2 кг исходного графита за одну загрузку реактора. Технология допускает масштабирование.



Кроме стандартного оксида графена, разработана оригинальная технология получения оксида графена глубокого (двойного) окисления, который характеризуется меньшим латеральным размером частиц и повышенной коллоидной устойчивостью в различных средах.

На основе оксида графена нами синтезированы ряд новых нанокмпозиционных материалов. Так, путем гидротермальной карбонизации системы оксид графена – карбоксиметилцеллюлоза получен мезопористый углеродный материал с узким распределением пор по размерам:



Одним из важных направлений применения материалов на основе оксида графена являются антикоррозионные лакокрасочные покрытия. Мы разработали системы на основе модифицированного оксида графена, хорошо совмещающиеся с эпоксидной смолой и, другой вариант, дающие устойчивые коллоидные растворы в воде. Такие вещества могут быть применены как антикоррозионные добавки в лакокрасочные материалы на органической и водно-дисперсионной основе.

Вариант для органических красок представляет собой оксид графена, модифицированный полианилином в различных формах (эмеральдин-основание или протонированный фосфорной кислотой). Опционально, может содержать октадециламин для улучшения сродства к органическим системам. Тестирование показало значительное улучшение коррозионной стойкости эпоксидного покрытия на стали-3 при добавке 0,3% указанного наполнителя.

В качестве добавок в водно-дисперсионные краски были синтезированы также водные коллоидные композиции, содержащие композит оксид графена/полианилин, модифицированный фенол-формальдегидной смолой или фосфатом аминокумулена, опционально, с добавкой эпоксидных соединений.

1. Пат. РФ 2709594. Способ получения оксида графена. Опубликовано: 18.12.2019. Бюл. № 35.

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МЕДИ И АЛЮМИНИЯ, УПРОЧНЕННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

Рудской А.И.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ)

Выполнен широкий класс исследований, посвященных методам синтеза, изучению структуры и физико-механических свойств материалов на основе меди и алюминия, упрочненных 0, 1 и 2-мерными углеродными наноструктурами (рис.1).

Проведен сравнительный анализ структуры, стабильности свойств этих материалов [1]. Нанокompозиты получены на базе фуллеренов и фуллереновой сажи углеродных нанотрубок и нановолокон, графена.

В качестве методов синтеза были использованы: синтез на основе прямого химического вакуумного осаждения углеродных наноструктур на поверхности металлических порошков, термохимический синтез, механическое легирование, а также сочетание этих методов.

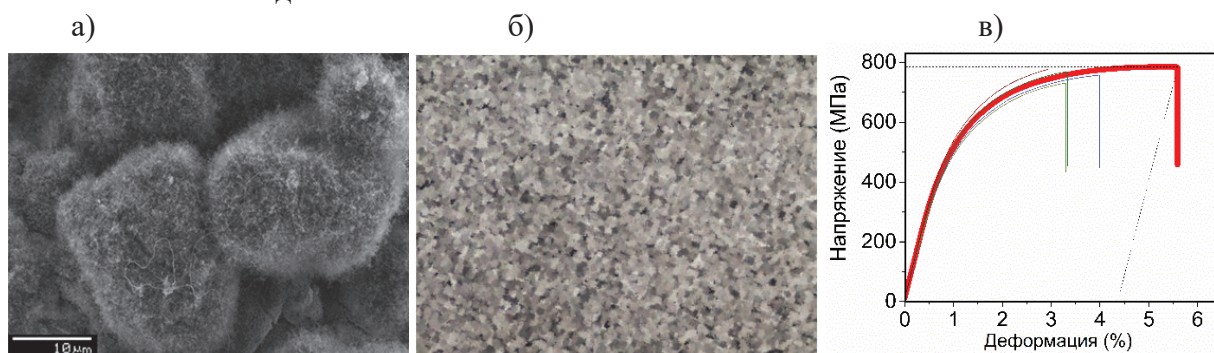


Рис. 1. Микрофотографии порошков алюминия с выращенными на поверхности углеродными нанотрубками (полученные в сканирующем электронном микроскопе) (а), структура материала после компактирования (б), кривые напряжение-деформация, полученные при испытании на изгиб (в)

Проведенные исследования показали возможность направленного регулирования свойств сплавов на основе меди и алюминия в широком диапазоне, а также получения экстремальных физико-механических характеристик материалов [2-4].

Можно утверждать, что механические свойства и теплофизические характеристики композитов сильно зависят от метода получения композита и вида углеродных наноструктур, что связано с особенностями межфазного взаимодействия, а также различными механизмами упрочнения, которые осуществляются в данных материалах.

Показано, что правильный выбор и функционализация углеродных наноструктур, применяемых для создания композиционных материалов, а также варьирование технологии их синтеза, позволяет в широком диапазоне регулировать физико-

механические свойства и осуществлять направленный выбор материала для конкретных применений.

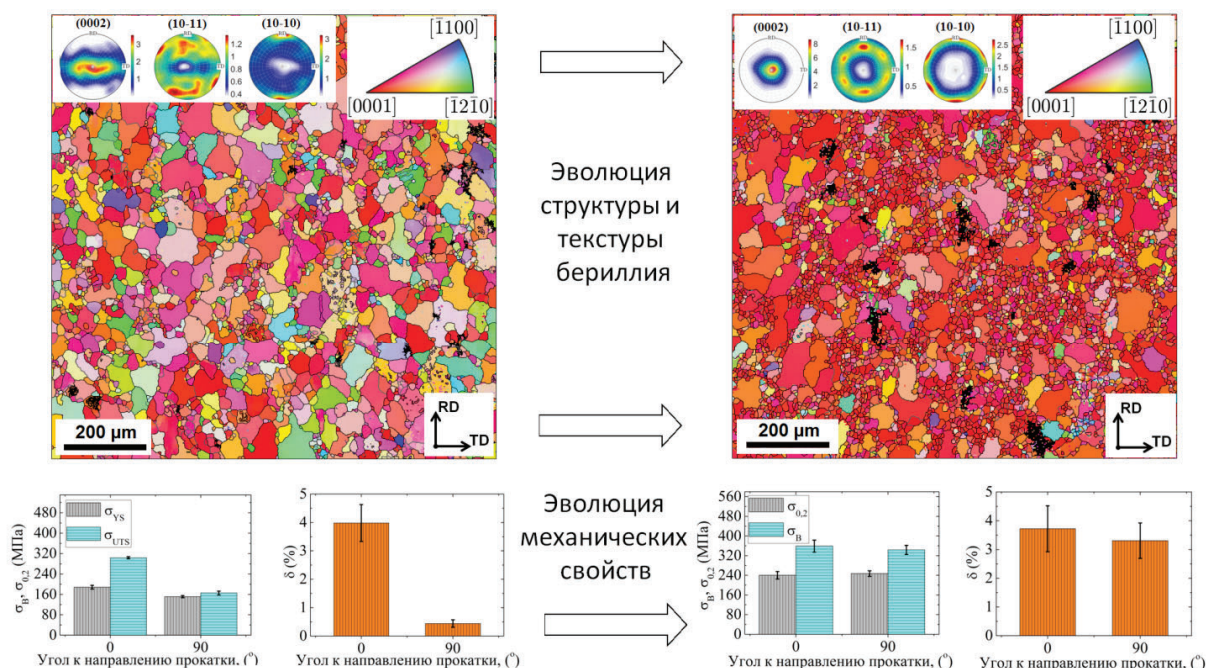
1. А.И. Рудской Металломатричные нанокпозиционные материалы Cu-C: синтез // Доклады Российской Академии наук. 2020. Т. 492-493. С. 59-64.
2. Krylova, K.A., Baimova, J.A., Lobzenko, I.P., Rudskoy, A.I. Crumpled graphene as a hydrogen storage media: Atomistic simulation // (2020) Physica B: Condensed Matter, 583, статья № 412020.
3. Rysaeva, L.K., Baimova, J.A., Dmitriev, S.V., Lisovento, D.S., Gorodtsov, V.A., Rudskoy, A.I. Elastic properties of diamond-like phases based on carbon nanotubes // (2019) Diamond and Related Materials, 97, статья № 107411.
4. Tolochko, O.V., Koltsova, T.S., Bobrynina, E.V., Rudskoy, A.I., Zemtsova, E.G., Kirichenko, S.O., Smirnov, V.M. Conditions for production of composite material based on aluminum and carbon nanofibers and its physic-mechanical properties // (2019) Nanomaterials, 9 (4), статья № 550.

ТОНКИЕ БЕРИЛЛИЕВЫЕ ФОЛЬГИ С ПОВЫШЕННЫМИ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ

А.И. Рудской, В.В. Мишин, И.А. Шишов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Разработаны технологии холодной прокатки и высоковакуумной термической обработки бериллия, позволяющие получать тонкие вакуумноплотные бериллиевые фольги (толщиной 5-30 мкм) для рентгеновской техники с повышенным уровнем физико-механических и эксплуатационных свойств. Экспериментальные данные по исследованию структуры в сочетании с результатами математического моделирования пластической деформации бериллия с помощью вязкопластической самосогласованной модели позволили выявить механизмы повышения физико-механических и эксплуатационных свойств бериллиевых фольг за счет активации призматической системы скольжения



Эволюция структуры и механических свойств бериллия при холодной прокатке и высоковакуумной термической обработке

1. А.И. Рудской Нанотехнологии в металлургии. - СПб.: Наука. 2007. - 186 с.
2. V.V. Mishin et al. Enhanced mechanical properties of hot-rolled beryllium foils // Materialia. 2020. Vol. 11. P. 100726.
3. V.V. Mishin et al. Structure evolution and mechanical properties of beryllium foils subjected to cold rolling and high-vacuum annealing // Materials Science and Engineering A. 2019. Vol. 750, pp. 60-69.

**ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ
УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОЙ (УМЗ) СТРУКТУРЫ МЕДНЫХ СПЛАВОВ,
ЛЕГИРОВАННЫХ Cr и Zr, ПРИ ОБЫЧНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ**
С.В. Добаткин

Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова РАН

Исследовано изменение трещиностойкости сплавов Cu-0,15Zr и Cu-0,5Cr-0,08 Zr после интенсивной пластической деформации путем ротационнойковки (РК). Для этого образцы данных сплавов закаливались с 1000 °С с выдержкой в течение 2 часов и охлаждением в воде. РК проводилась при комнатной температуре на образцах сплава диаметром 20 мм и длиной 20 см со степенями истинной деформации 0,4; 1,1 и 2,1. После РК со степенью истинной деформации 2,1 из полученного прутка и из исходных сплавов изготавливались цилиндрические образцы длиной 42 мм и 6мм диаметром для испытаний на трещиностойкость по ГОСТ 25.506-85.

Сплав Cu-0,15Zr после закалки показал коэффициент трещиностойкости (K) 10,23 (МПа·м^{1/2}), после закалки и РК он показал K = 18,18 (МПа·м^{1/2}). Сплав Cu-0,5Cr-0,08Zr после закалки показал коэффициент трещиностойкости 10,14 (МПа·м^{1/2}), после закалки и РК он показал коэффициент трещиностойкости 20,02 (МПа·м^{1/2}). Таким образом, показано, что ротационная ковка повысила коэффициент трещиностойкости сплавов в 2 раза.

Проведено исследование электродов контактной сварки, изготовленных из ультрамелкозернистого (УМЗ) сплава Cu-0,5%Cr-0,08%Zr после ротационнойковки (РК) и последующего старения. Деформацию проводили при комнатной температуре. Деформация приводит к повышению предела прочности с 227 до 597 МПа для сплава Cu-0,5%Cr-0,08%Zr. Из исследуемого сплава в УМЗ и крупнозернистом состояниях были изготовлены вставки для составных водоохлаждаемых электродов. Испытания электродов проводили при усилии 3000 Н вплоть до 4000 циклов сварки. Степень износа оценивали как относительное уширение рабочей поверхности электрода в ходе сварки. Выявлено, что износ электродов повышается с увеличением числа циклов сварки, при этом в крупнозернистом сплаве этот процесс идет более интенсивно. Отмечено, что во всем диапазоне циклов сварки, износ рабочей зоны УМЗ вставок в среднем в 3,5 раза меньше, чем износ крупнозернистых вставок.

1. G. Purcek, H. Yanar, M. Demirtas, D.V. Shangina, N.R. Bochvar, S.V. Dobatkin. Microstructural, mechanical and tribological properties of ultrafinegrained Cu-Cr-Zr alloy processed by high pressure torsion // Journal of Alloys and Compounds 816 (2020) 152675
2. B.B. Straumal, A.R. Kilmametov, B. Baretzky, O.A. Kogtenkova, P.B. Straumal, L. Lityńska-Dobrzyńska, R. Chulist, A. Korneva, P. Zięba High pressure torsion of Cu-Ag and Cu-Sn alloys: Limits for solubility and dissolution // Acta Materialia 195 (2020) 184
3. N.S. Martynenko, P.B. Straumal, N.R. Bochvar, D.A. Aksenov, G.I. Raab, S.V. Dobatkin. Effect of high-pressure torsion and subsequent aging on the structure, microhardness, and electrical conductivity of Cu-7%Cr and Cu-10%Fe alloys // Journal of Physics: Conference Series, 2020

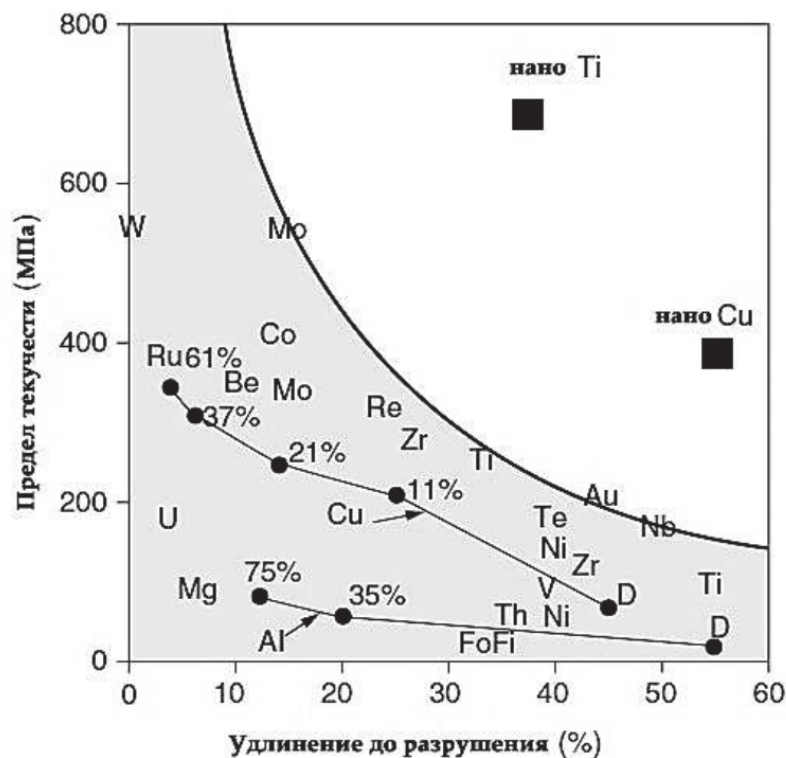
ДОСТИЖЕНИЕ КОМБИНАЦИИ ОЧЕНЬ ВЫСОКОЙ ПРОЧНОСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ НА РЯДЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Р.З. Валиев

*Уфимский государственный авиационный технический университет
Санкт-Петербургский государственный университет*

Проведен ряд исследовательских работ по достижению одновременно очень высокой прочности и пластичности на ряде металлических биосовместимых сплавов медицинского назначения на основе Mg и Ti, а также нержавеющей стали за счет их наноструктурирования методами интенсивной пластической деформации ИПД. Полученные наноструктурные металлы отличаются повышенной прочностью и долговечностью, что определяет их выбор в качестве материала для изготовления имплантатов улучшенной конструкции для стоматологии и ортопедии. Инновационные подходы наноструктурирования вышеуказанных материалов, основанные на сочетании формирования УМЗ структуры и образования нанодисперсных выделений вторых фаз и сегрегаций, связанные с выбором режимов методов ИПД, позволят обеспечить в металлах и сплавах не только рекордную прочность, но и их пластичность и вязкость, открывая путь к повышению целого комплекса их служебных свойств: ударной вязкости, низкой чувствительности к концентраторам напряжения, усталостной прочности и т.д. Это, в свою очередь, позволит существенно миниатюризировать медицинские имплантаты, предлагая, как усовершенствованные, так и новые перспективные конструкции имплантатов и сопутствующих медицинских инструментов. Кроме того, проведение поверхностной модификации имплантатов позволит повысить их биофункциональные свойства.

Данные исследования ведутся в сотрудничестве с профессором С.В. Добаткиным (МИСиС) и его коллегами.

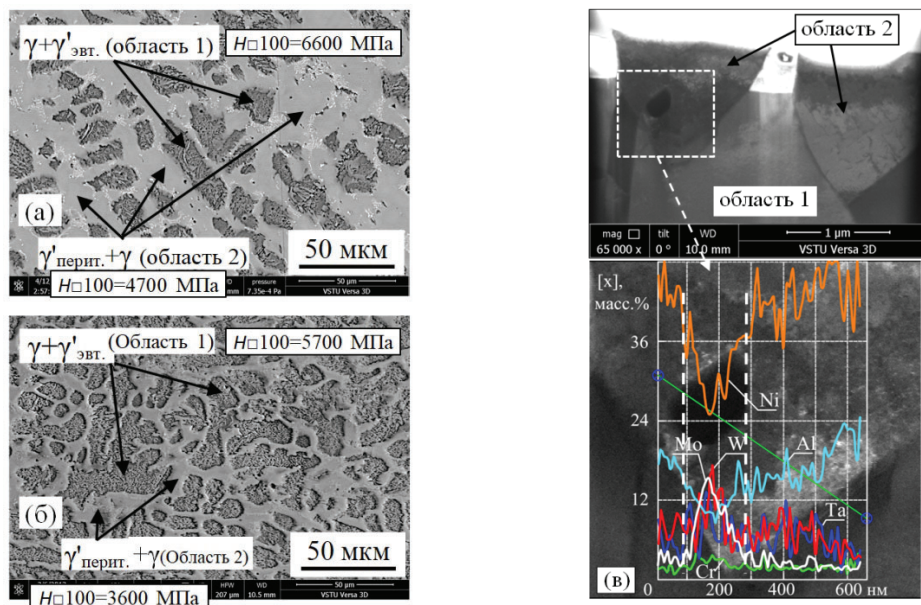


Парадокс прочности и пластичности металлов, подвергнутых ИПД: уникальная комбинация высокой прочности и пластичности наноструктурной меди и титана, подвергнутых ИПД (две верхние точки), принципиально отличает их от обычных КЗ металлов (нижние точки относятся к металлам чистоты 99,5–99,9%)

1. Jeno Gubicza, Moustafa El-Tahawy, Ja'nos L. La'ba'r, Elena V. Bobruk, Maxim Yu Murashkin, Ruslan Z. Valiev, and Nguyen Q. Chinh. Evolution of microstructure and hardness during artificial aging of an ultrafine-grained Al-Zn-MgZr alloy processed by high pressure torsion, Materials, Published online: 11 September 2020
2. Р.З. Валиев, Новые исследования парадокса прочности и пластичности в наноматериалах, Вестник СПбГУ. Математика. Механика. Астрономия. 2020. Т. 7 (65). Вып. 1. С. 112-127.
3. R.Z. Valiev, V.U. Kazykhanov, A.M. Mavlyutov, A.A. Yudakhina, N.Q. Chinh, M.Yu. Murashkin, Superplasticity and high strength in Al-Zn-Mg-Zr alloy with ultrafine grains, Adv. Eng. Mater. Vol. 22 (2020), paper No. 1900555

**ТЕРМОИЗНОСОСТОЙКИЙ ДО 1150°C НАПЛАВОЧНЫЙ СПЛАВ НА ОСНОВЕ
ЛЕГИРОВАННОГО АЛЮМИНИДА НИКЕЛЯ Ni_3Al
В.И. Лысак, И.В. Зорин, А.А. Артемьев, Ю.Н. Дубцов
Волгоградский государственный технический университет**

Впервые установлено, что микролегирование наплавленного металла системы Ni-Al-Cr-W-Mo-Ta малым количеством (до 0,6 масс.%) наноразмерных частиц монокарбида вольфрама (WC) способствует изменению формы и размеров частиц дисперсной γ' -(Ni_3Al)-фазы, соотношения между объемным содержанием в структуре двух характерных областей, содержащих γ' -фазы, а также более равномерному распределению между этими областями тугоплавких легирующих элементов. Это дает возможность повысить уровень стойкости наплавленного металла к термосиловому воздействию в условиях циклического изменения температур в диапазоне 20-1150 °С, по сравнению металлом, наплавленным с использованием зарубежных наплавочных материалов на базе высоколегированных никелевых и кобальтовых сплавов.



Характерные структуры наплавленного металла, сформированные под влиянием наноразмерных частиц (WC) (а) и без них (б); (в) - участок образования γ' -фазы из γ -твердого раствора металла и распределение легирующих элементов.

1. G.N. Sokolov, I.V. Zorin, A.A. Artem'ev, S.K. Elsukov, YuN. Dubtsov, V.I. Lysak. Thermal- and wear-resistant alloy arc welding depositions using composite and flux-cored wires with TiN, TiCN, and WC nanoparticles // Journal of Materials Processing Technology. 2019. Vol. 272. P. 100-110.

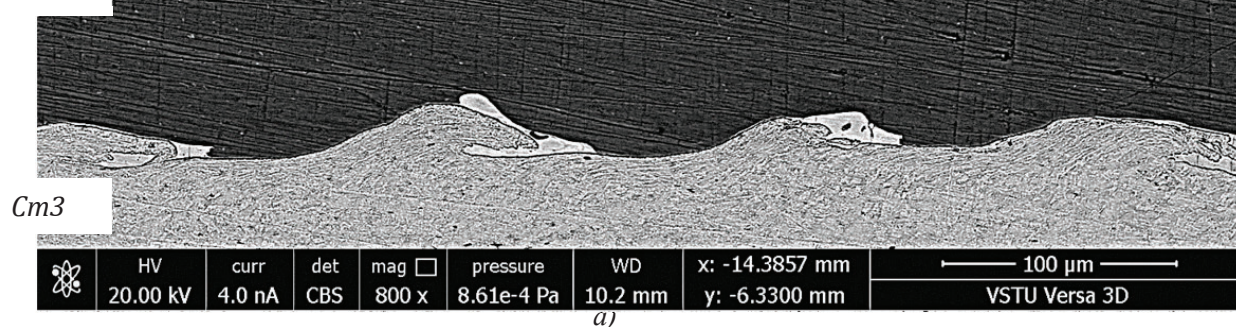
2. I.V. Zorin, YuN. Dubtsov, G.N. Sokolov, V.I. Lysak Special features of structure formation in deposited metal based on alloyed nickel aluminide and its high-temperature properties // Metal Science and Heat Treatment. 2019. Vol. 60, No. 11–12. P. 757-763.
3. А.А. Артемьев, А.А. Антонов, Г.Н. Соколов, В.И. Лысак. Test procedure of cladde alloys for resistance against high temperature abrasive wear // Journal of Friction and Wear. 2017. Vol. 38, No. 3. C. 225-230.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ УЛЬТРАЗВУКА В ПРОЦЕССЕ ВЗРЫВНОГО НАГРУЖЕНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ КОМПОЗИТА ТИТАН-СТАЛЬ

В.И. Лысак, С.В. Кузьмин, Е.В. Кузьмин, М.П. Королев
Волгоградский государственный технический университет

В качестве исходных материалов использовали пластины из стали Ст3 толщиной 10 мм и титана BT1-0 толщиной 5 мм. В работе были выбраны низкоинтенсивные режимы соударения, обеспечивающие энергетические затраты на пластическую деформацию в околосшовной зоне на уровне критических значений. Сварку взрывом осуществляли при одновременном воздействии ультразвука на неподвижную пластину (исследуемый образец) по схеме с встречно-направленным распространением ультразвуковых колебаний относительно направления процесса сварки. Для сравнения результатов исследования одновременно производили сварку взрывом контрольных образцов (таких же пар металлов) на идентичных режимах взрывного нагружения, но без воздействия ультразвука.

BT1-0



BT1-0

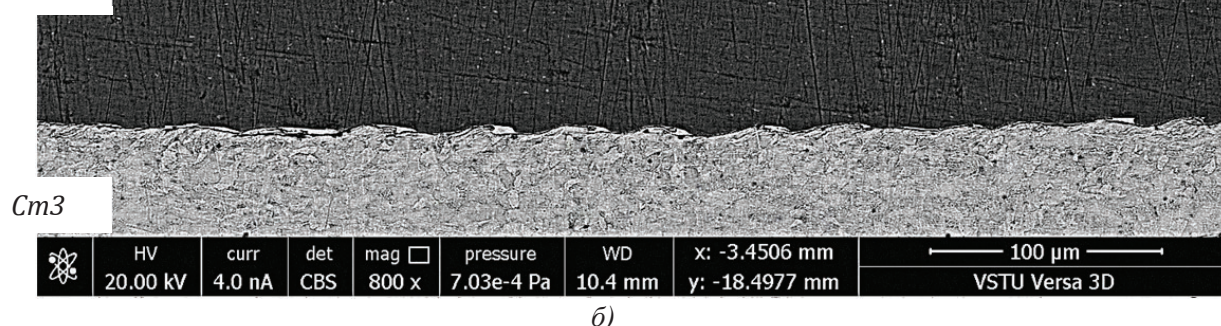


Рис. 1. Микроструктура зоны соединения BT1-0+Ст3, полученного:

- а) – сварка взрывом (контрольный образец);
- б) – сварка взрывом с воздействием ультразвука

Результаты проведенных исследований показали, что в титано-стальных образцах, полученных сваркой взрывом с воздействием ультразвука, прочность на отрыв слоев выше, а количество оплавленного металла на границе соединения значительно меньше по сравнению с контрольными образцами без воздействия ультразвука (см. рис. 1, а, б, табл.). Так, среднее значение прочности на отрыв слоев в титано-стальных образцах, полученных сваркой взрывом с воздействием ультразвука, составляло порядка 505 МПа, в то время как в контрольных образцах значение прочности было значительно меньше – 315 МПа.

Металлографические исследования микроструктуры околошовной зоны показали, что в контрольных образцах граница соединения слоев имеет слабо выраженный синусоидальный профиль ($2a = 25,2$ мкм; $\lambda = 154,7$ мкм) с незначительными участками оплавленного металла без завихрений. В образцах, полученных сваркой взрывом с воздействием ультразвука, граница соединения имеет практически прямолинейный профиль ($2a = 4,3$ мкм; $\lambda = 36,5$ мкм) с значительно меньшим количеством оплавленного металла. Так, удельная площадь оплавленного металла в титано-стальных образцах, полученных сваркой взрывом с воздействием ультразвука, составляла $0,5$ мкм²/мкм, в то время как в контрольных образцах – $1,7$ мкм²/мкм (см. табл.).

Таблица – Сравнительные данные результатов исследования микроструктуры и механических свойств соединения титан-сталь

№ обр.	Свариваемые материалы	Прочность на отрыв слоев, МПа	Удельная площадь оплавленного металла, мкм ² /мкм	Размах волны, $2a$, мкм	Длина волны, λ , мкм
1	BT1-0+Ст3	505	0,5	4,3	36,5
1к		315	1,7	25,2	154,7

к – контрольный образец

Незначительное количество участков оплавленного металла как в контрольных, так и в исследуемых титано-стальных образцах связано с ограничением верхнего предела скорости точки контакта до 2200 м/с, что привело к снижению степени локализации пластической деформации металла околошовной зоны и как следствие более равномерному распределению температуры в ней.

Таким образом, в работе экспериментально установлено, что введение дополнительной энергии ультразвука в процессе взрывного нагружения на низкоинтенсивных режимах позволяет повысить качество соединения титан-сталь, проявляющееся в изменениях структуры, увеличении прочности, существенном уменьшении параметров волн и количества оплавленного металла по сравнению со сваркой взрывом без применения ультразвука.

1. Влияние параметров высокоскоростного соударения на структуру и свойства соединений при сварке взрывом с одновременным воздействием ультразвука / Е.В. Кузьмин, В.И. Лысак, С.В. Кузьмин, М.П. Королев // Физика металлов и металловедение. - 2019. - Т. 120, № 2. - С. 212-218.
2. Е.В. Кузьмин, М.П. Королев, С.В. Кузьмин, В.И. Лысак. Investigation of residual stress in composites produced by explosion welding with ultrasound. // Journal of Physics: Conference Series. - 2020. - Vol. 1666. - 012026. - 7

ЗАКОНОМЕРНОСТИ УПЛОТНЕНИЯ ПОРОШКОВЫХ СМЕСЕЙ КАРБИДА КРЕМНИЯ С МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ТИТАНОВОЙ СВЯЗКОЙ ПРИ ВЗРЫВНОМ ПРЕССОВАНИИ

В.И. Лысак, С.В. Кузьмин, А.В. Крохалев, В.О. Харламов
Волгоградский государственный технический университет

При исследовании механизма прессуемости взрывом смесей порошков карбида кремния с титаном выявлено, что в отличие от материалов системы $\text{Cr}_3\text{C}_2\text{-Ti}$ [1], лучшее уплотнение наблюдается при низком содержании металлической связки (рис. 1а), т.е. увеличение содержания в исходной порошковой смеси карбидной составляющей, имеющей высокие значения твердости, не ухудшает, а наоборот улучшает её прессуемость.

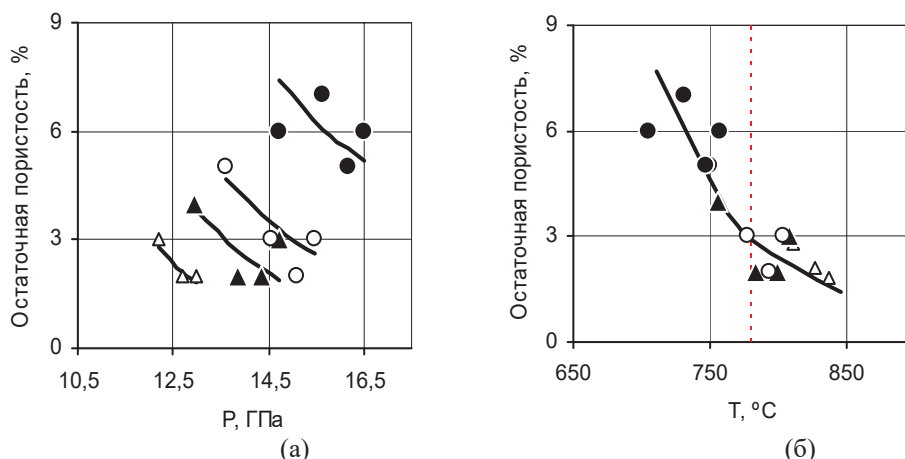


Рис.1. Влияние давления ударно-волнового сжатия (а) и температуры разогрева порошка в ударных волнах (б) на остаточную пористость полученных взрывом материалов системы SiC+Ti с различным содержанием связки:
 Δ - 20, $\blacktriangle$ - 30, $\circ$ - 40, $\bullet$ - 50 об. % Ti, ---- - $0,35T_{\text{пл. SiC}}$

Подобное поведение компонентов порошковых смесей SiC с Ti при взрывном прессовании обусловлено более высокой скоростью звука в карбиде кремния (10,5 км/с против 4,1 км/с) и, соответственно, более высокой скоростью распространения волн сжатия по каркасу из частиц SiC , чем по частицам Ti . В результате частицы карбида кремния первыми приходят в движение и перемещаются в поры исходной порошковой смеси, обеспечивая уплотнение материала, тем более сильное, чем больше в объеме смеси SiC и исходных пор.

Второй причиной обнаруженного эффекта является больший разогрев порошковых смесей карбида кремния с меньшим содержанием титановой связки при одинаковых технологических параметрах взрывного нагружения (рис. 1б).

Частицы SiC , имевшие первоначально осколочную форму (рис.2а) оказываются существенно продеформированными, что обеспечивает формирование плотного контакта между ними. Воздух, содержащийся в исходной порошковой смеси, вытесняется ударной волной из объема прессовки и сохраняется лишь в виде отдельных микропор на границах частиц SiC друг с другом (рис. 2б).

Полученные данные позволяют сделать вывод, что использование взрывного нагружения порошков для получения материалов на основе карбида кремния является перспективным и позволяет осуществить процесс их консолидации на стадии прессования без последующего спекания.

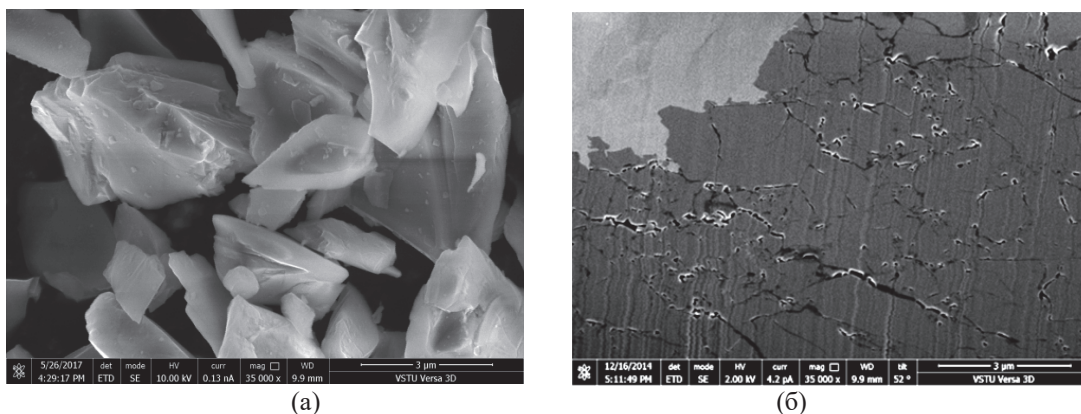


Рис.2. Вид частиц исходных карбида кремния (а) и микроструктура материала SiC-Ti, полученного взрывом (б)

1. А.В. Крохалев, В.О. Харламов, С.В. Кузьмин, В.И. Лысак. Химический состав и структура межфазных границ в порошковых твёрдых сплавах Cr(3)C(2)-Ti после взрывного компактирования и последующего нагрева // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. - 2020. - № 2. - С. 4-13.
2. А.В. Крохалев, В.О. Харламов, С.В. Кузьмин, В.И. Лысак. Формирование структуры порошковых материалов на основе карбида кремния при взрывном прессовании // Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах. - 2020. - Т. 494 (Сентябрь – Октябрь). - С. 42-44.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМИЧЕСКОГО И УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ДИФфуЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В СВАРЕННЫХ ВЗРЫВОМ СЛОИСТЫХ КОМПОЗИТАХ И ПОКРЫТИЯХ НА ИХ ОСНОВЕ **В.И. Лысак, В.Г. Шморгун, А.И. Богданов, В.П. Кулевич, Л.Д. Исакова** *Волгоградский государственный технический университет,* *Аналитический центр НЦВО РАН*

Выявлено влияние термического и ультразвукового воздействия на параметры процесса диффузионного взаимодействия в результате протекания гомогенных (на границе контакта твердое тело-твердое тело) реакций между сваренными взрывом алюминием и хромоникелевыми сплавами. На основе предложенных моделей структуры (рис. 1) и обработки массива экспериментальных данных по кинетике роста диффузионных зон получены эмпирические уравнения (1-4), позволяющие контролировать кинетику гомогенных реакций во взаимосвязи с режимами термообработки при оптимальных параметрах ультразвукового воздействия (частота 18-20 кГц, амплитуда 10-15 мкм).

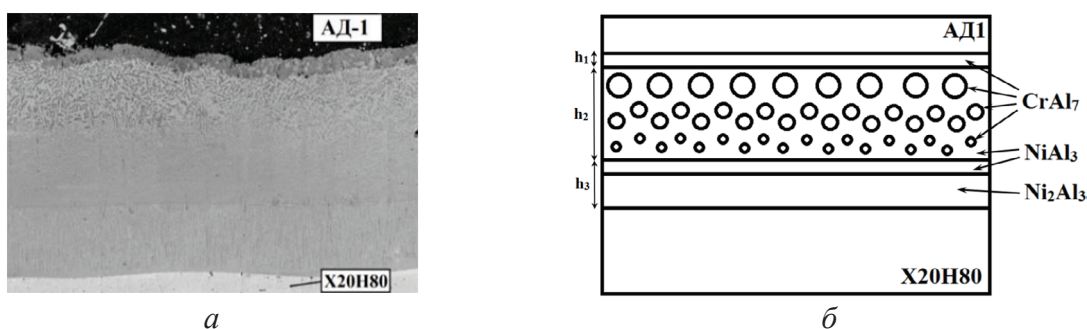


Рис. 1.СЭМ- изображение (а) и модель структуры (б) диффузионной зоны в сваренном взрывом биметалле X20H80+АД1

$h^2 = 2,1 \cdot 10^9 \exp\left(-\frac{166020}{RT}\right) \cdot \left[\tau - 30 \exp\left(-\frac{155000}{RT}\right)\right] \quad (1)$	$h_1^2 = 7,4 \cdot 10^9 \exp\left(-\frac{203600}{RT}\right) \cdot \left[\tau - 34,6 \exp\left(-\frac{167000}{RT}\right)\right] \quad (2)$
$h_3^2 = 3,8 \cdot 10^9 \exp\left(-\frac{178070}{RT}\right) \cdot \left[\tau - 28,2 \exp\left(-\frac{120030}{RT}\right)\right] \quad (3)$	$h_2 = h - h_1 - h_3. \quad (4)$

Экспериментально доказано, что воздействие ультразвука не оказывает влияния на фазовый состав диффузионной зоны, а её толщина увеличивается на 30-40 % при фиксированной температуре интенсивной диффузии.

Исследованы закономерности формирования и трансформации структуры и свойств слоистых покрытий систем NiCr-Al, полученных с использованием термического и ультразвукового воздействия. Для практически актуальных слоистых покрытий (Ni₂Al₃+CrAl₇)/X20H80 экспериментально установлено, что при их высокотемпературных нагревах изменение фазового состава внешнего слоя от Ni₂Al₃+CrAl₇ до Ni₃Al(Cr) сопровождается формированием на межслойной границе сплошной прослойки твердого раствора переменной концентрации Cr(Ni,Al), являющейся диффузионным барьером, предотвращающим проникновение атомов Al в сплав X20H80 и обеспечивающим в исследованном временном диапазоне содержание Al на поверхности покрытия не менее 15 мас. %, достаточное для образования оксидной пленки Al₂O₃ (рис. 2).

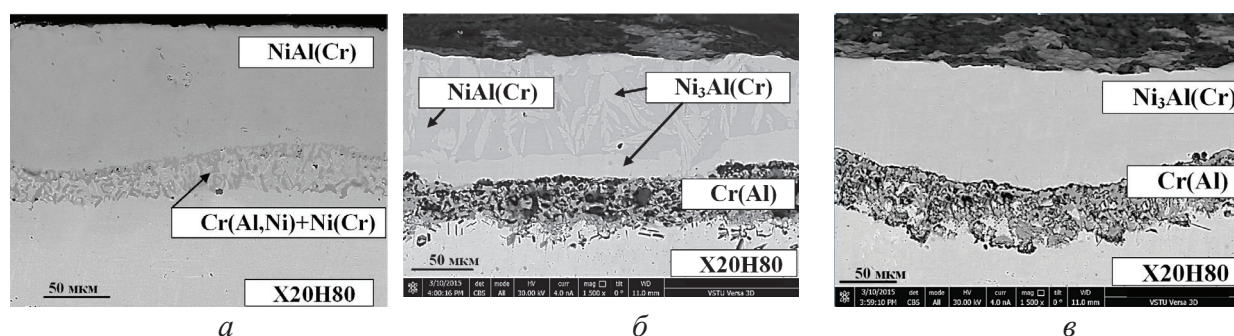


Рис.2. Трансформация структурно-фазового состояния слоистого покрытия системы NiCr-Al при нагреве до 1100°C в течение 10 (а), 400 (б) и 500 (в) часов

Впервые показано, что формирование сплошной прослойки твердого раствора переменной концентрации Cr(Ni,Al) обусловлено торможением диффузионного потока атомов Cr из NiCr сплава во внешний слой покрытия из-за его ограниченной растворимости в алюминиды никеля и железа.

1. Shmorgun, V.G., Bogdanov, A.I., Shcherbin, D.V. Kinetics of diffusion interaction in Cr15Ni60-AD1 layered composite (2020) Solid State Phenomena, 299 SSP, pp. 760-765. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.299.760
2. Shmorgun, V.G., Bogdanov, A.I., Kulevich, V.P., Kharlamov, V.O. Kinetics of phase transformations in feal(Cr,si) / fe3al(cr,si) / fe(al,cr,si) laminated coating on the cr15al5 alloy (2020) Materials Science Forum, 992 MSF, pp. 493-497.
3. Shmorgun, V.G., Bogdanov, A.I., Kulevich, V.P., Shcherbin, D.V. Structure and phase composition of diffusion zones formed as a result of homogeneous and heterogeneous reactions at the boundary of the AD1-Cr15Ni60 composite (2019) Journal of Physics: Conference Series, 1399 (4), статья № 044052, DOI: 10.1088/1742-6596/1399/4/044052
4. V.G. Shmorgun, A.I. Bogdanov, V.P. Kulevich, The oxidation behaviour of layered Al-Ni coating at high-temperature heating, Materials Today: Proceedings, 2020, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.08.170>.

ОКИСЛИТЕЛЬНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ РУТИЛА

К.А. Солнцев

Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова РАН

В результате применения подхода окислительного конструирования были получены компактные образцы керамики на основе рутила при 875 °С в течение 160 суток. Анализ распределения микротвердости по толщине образца рутила с течением времени синтеза показал неоднородную структуру синтезированной керамики, что свидетельствует о дефектах материала из-за его пористости. Установлены закономерности изменения характера слоистой структуры керамики в зависимости от участка кинетической кривой прямого окисления титана. Показано, что наличие дефекта в виде зазора между слоями, образующегося при высокотемпературном окислении массивных титановых заготовок на стадии завершения экспоненциального роста кинетической кривой, обусловлено естественным барьером – керамическим слоем рутила, что ограничивает свободный доступ кислорода к границе TiO_2/Ti .

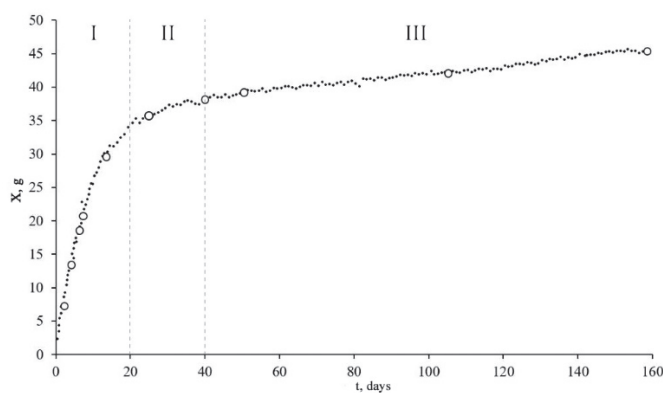


Рисунок 1 – Кинетика окисления титана при 875 °С.

I – экспоненциальный рост; *II* – завершение экспоненциального роста; *III* – линейный участок

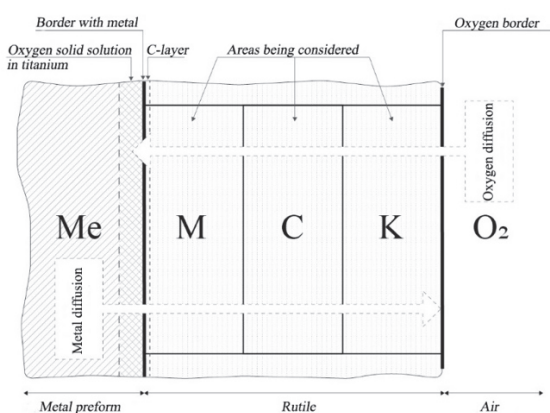


Рисунок 2 – Принципиальная схема формирования рутильной керамики на поверхности титановой заготовки в рамках подхода окислительного конструирования.

C – центральная область образца; *M* – область образца, граничащая с металлом; *K* – область образца, граничащая с кислородом

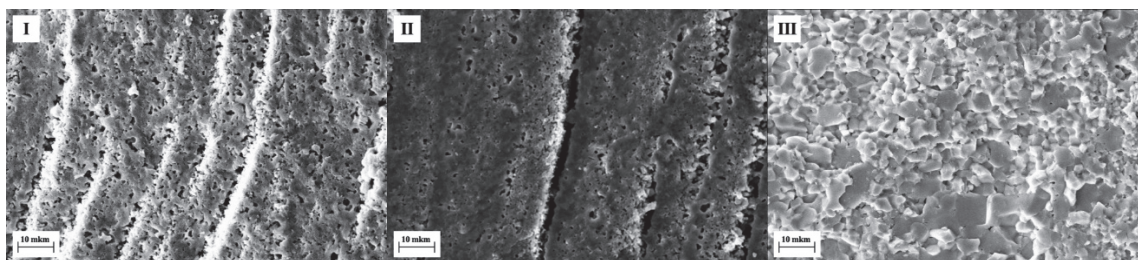


Рисунок 3 – РЭМ-изображения поперечного скола *M*-области рутильной керамики.

СВС МОНОКАРБИДА ТАНТАЛА (TaC)
*Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения
им. А.Г. Мерджанова РАН*

Карбид тантала является крайне востребованным материалом для современной промышленности, так как является наиболее химически стойким соединением при комнатной температуре по отношению к серной, соляной, ортофосфорной, азотной, щавелевой кислотам и большинства их смесей. Кроме того, карбид тантала входит в состав твёрдых сплавов марок ТТК, содержание которого может составлять от 3% до 17%. Добавка карбида тантала позволяет сохранять остроту режущей кромки резца и уменьшает склонность к привариванию стружки к резцу. Также способствует уменьшению размеров зёрен карбидов в литейных сплавах.

Высокая температура плавления и стойкость против расплавленных металлов позволяет применять карбид тантала как футеровку тиглей для плавки тугоплавких металлов, испарителей для алюминия и цинка, а также нагревательных элементов высокотемпературных электрических печей. Совокупность вышеописанных свойств и определяет высокую востребованность данного материала для коммерческого использования. Поэтому исследование новых более экономически востребованных методов является крайне актуальным.

В рамках данного направления исследований были проведены работы по поиску химических схем синтеза порошкового монокарбида тантала (TaC) в режиме горения (СВС). Известно, что данная система обладает низкой калорийностью и реализация процесса горения без дополнительных источников тепла является затруднительна.

Для синтеза целевого продукта (TaC) в исследованиях нами была использована химическая схема с энергетической добавкой, что значительно может упростить метод получения TaC основанного на процессе послойного горения (фронтальный режим). В ходе проведенных исследований в течении текущего года было определено оптимальное соотношение компонентов исходной смеси и энергетической добавки. Синтезирован монокарбид тантала с низким содержанием низшего карбида (Ta_2C) и следами оксида (Ta_2O_5) (рис. 1).

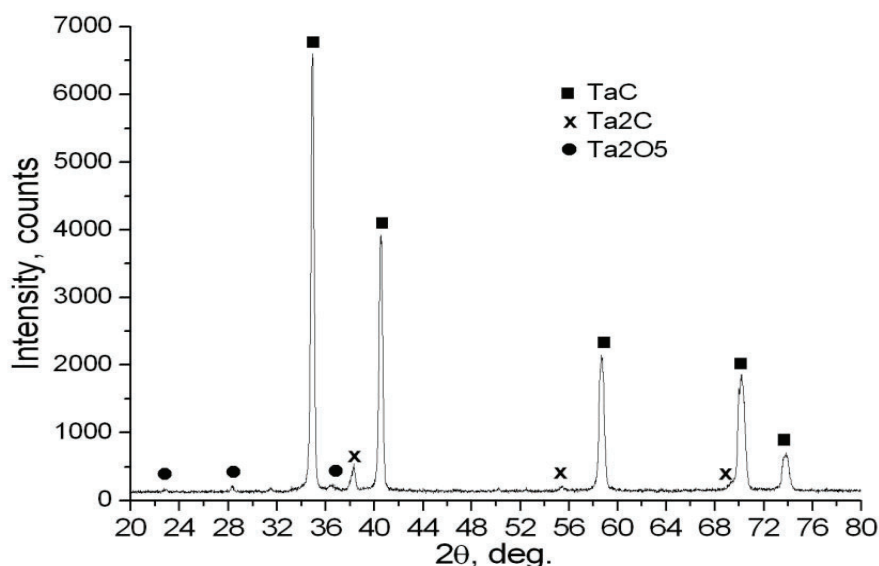


Рисунок 1. Данные РФА анализа для конечных продуктов при синтезе целевого продукта (TaC) методами СВС с введенной энергетической добавкой.

СВС В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ, СОДЕРЖАЩИХ В, Al, Ni, Ti, ТИТАНОВЫЙ СПЛАВ ВТ6

*Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения
им. А.Г. Мерджанова РАН*

Проведен синтез материалов (СВС) при предварительном подогреве смесей в многокомпонентных системах, содержащих В, Al, Ni, Ti, титановый сплав ВТ6 в виде порошков различной дисперсности.

На первой стадии исследований, на модельных образцах исследовали процесс горения на смесях, сочетались мелкодисперсные, активно-взаимодействующие, компоненты и менее активные в химическом отношении компоненты - в виде округлых частиц или плакированных гранул как крупнодисперсных, так и мелких. Использовались порошковые смеси: {Ti–В – гранулы сплава ВТ6}; {Ti–В – плакированные алюминием гранулы сплава ВТ6}; {Ti–В – плакированные никелем гранулы алюминия}. Показано, что процесс синтеза характеризуется стадийностью. Химическая реакция между основными мелкодисперсными компонентами (титаном и бором) выступает в качестве «химической печки» для разогрева крупных гранул и инициирования химической реакции между элементами их образующими. Увеличение начальной температуры смеси на 200-600°C приводит к увеличению температура горения (на несколько сот градусов) и скорости горения (в несколько раз). Начальный подогрев смеси способствует более интенсивному образованию интерметаллидов в гранулах, их плавлению, быстрому растеканию расплава по открытым капиллярам в диборидной матрице и полному заполнению пор в ней – с формированием в продукте синтеза композитной структуры с взаимопроникающими каркасами – керамическим (TiB₂) и интерметаллидным или металлическим (TiAl, Ti₃Al, Ti, сплав ВТ6, NiAl, Ni₃Al и др.). Размер кристаллических зёрен матрицы составляет от 0,2-2 мкм до 5-6мкм на границах с макропорами. Размер прослоек интерметаллида 0,2-1 мкм. Конечная структура синтезированном материале обладает развитой разномасштабной пористостью и содержит характерные крупные поры округлой формы (>100мкм в поперечнике) (рис. 1-3). При увеличении T₀ повышается сферичность формы пор; возрастает предел прочности при сжатии.

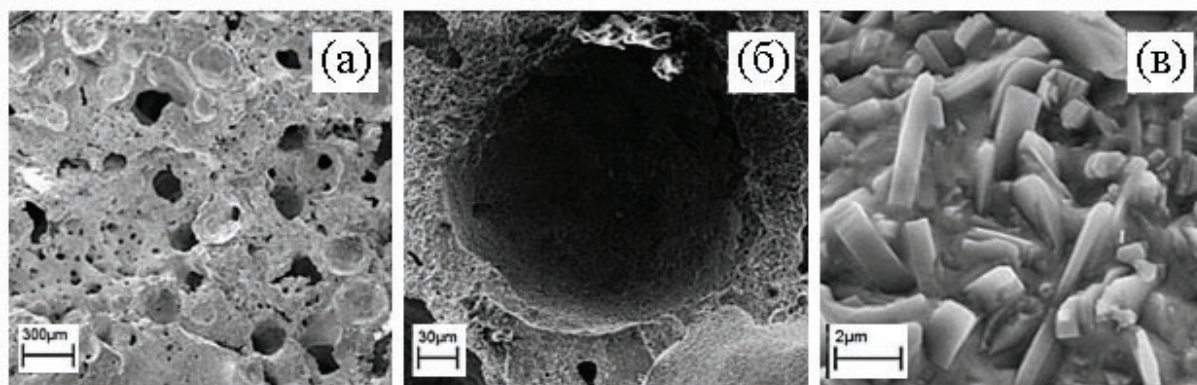


Рисунок 1. Структура продукта СВС (0,6Ti(гранулы ВТ6)+2В)+0,4(Ti+2В); $\alpha=0,6$; T₀=445°C): а) скол; б) макропора; в) кристаллиты TiB₂ матрицы в окружении сплава ВТ6.

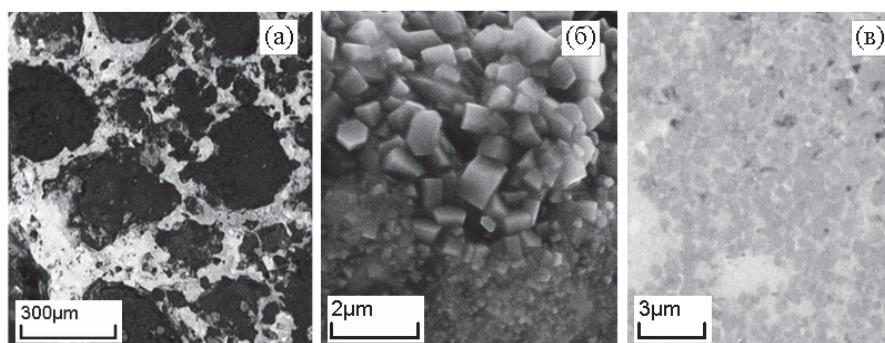


Рисунок 2. Структура продукта СВС (0,4Ti (гранулы ВТ6)+Al)+0,6(Ti+2B); $T_0=450^{\circ}\text{C}$; а, б –скол, в - шлиф): а) макропоры; б-в) кристаллиты TiB_2 матрицы в окружении алюминидов титана.

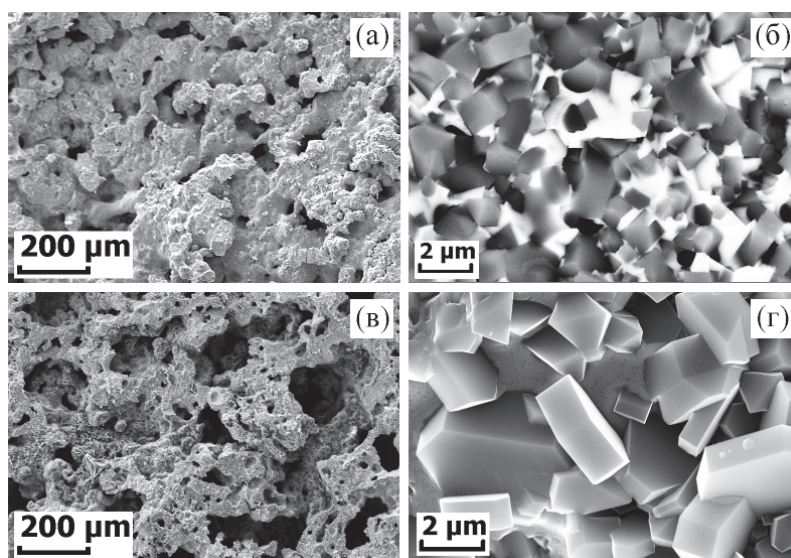


Рисунок 3. Структура продукта СВС (смесь 0,4(гранулы Al со слоем 80 вес.% Ni)+0,6(Ti+2B): а, в) – макроструктура (скол); б, г) – кристаллиты боридной матрицы в окружении алюминидов никеля; (размер исходных гранул: 40-63 мкм (а, б); 125-160 мкм (в, г)).

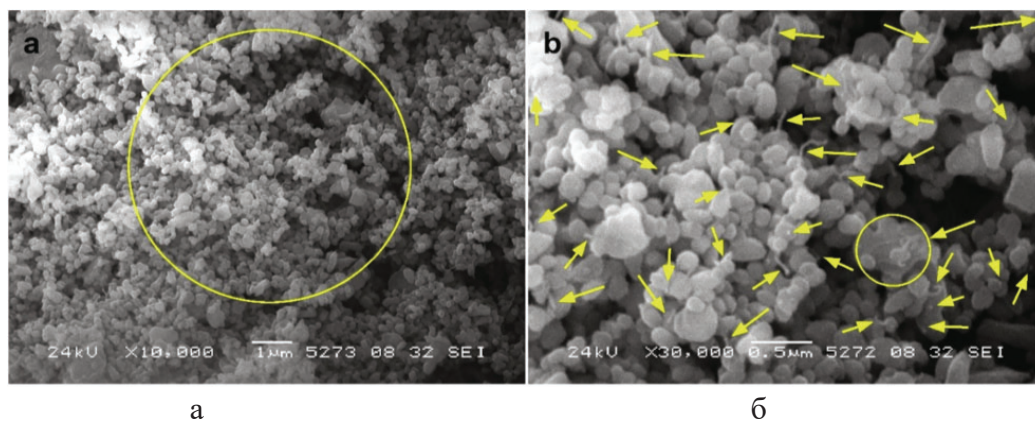
1. Ponomarev M.A., Loryan V.E. Synthesis of porous composite material at combustion of titanium and boron powders and nickel-clad aluminum granules. Russian Journal of Non-Ferrous Metals. 2020; N6; pp. 716–724. DOI: 10.3103/S1067821220060176

ТОКОПРОВОДЯЩИЕ КЕРАМИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ НАНО- Al_2O_3 , МОДИФИЦИРОВАННЫЕ МНОГОСЛОЙНЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Карагедов Г.Р., Кузнецов В.Л., Шутилов Р.А.
*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,
ФИЦ «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН»*

Синтезированы керамические композиты на основе наноразмерного $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, модифицированного многослойными углеродными нанотрубками (МУНТ), обладающие электропроводностью в широком диапазоне от 10^{-6} до 10^{-3} См/см. Показано, что размер частиц исходного порошка $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ оказывает значительное влияние на плотность и проводимость композитов МУНТ – Al_2O_3 . При консолидации смесей нанодисперсного порошка $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (с размером частиц 100 нм) и МУНТ методами холодного

изостатического прессования с последующим спеканием и методом горячего изостатического прессования удается получать композиты с высокой плотностью (~ 98 %). Композиты, полученные смешением исходных компонентов в среде ацетона, демонстрируют наиболее высокую проводимость. При синтезе композитов МУНТ – Al_2O_3 с использованием порошка $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с более крупным размером частиц (400 нм) в аналогичных условиях отмечается существенное ухудшение спекаемости, что приводит к значительному снижению плотности и проводимости композитов.



СЭМ изображения смеси 0,35 % МУНТ- Al_2O_3 . Стрелки указывают на единичные нанотрубки, адсорбированные на частицах $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$.
(а) – общий вид; (б) – увеличенное изображение.

1. Shutilov R.A., Kuznetsov V.L., Moseenkov S.I., Karagedov G.R., Krasnov A.A., Logachev P.V. Vacuum-tight ceramic composite materials based on alumina modified with multi-walled carbon nanotubes // *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*. 2020. Vol. 254, 114508. DOI: 10.1016/j.mseb.2020.114508.

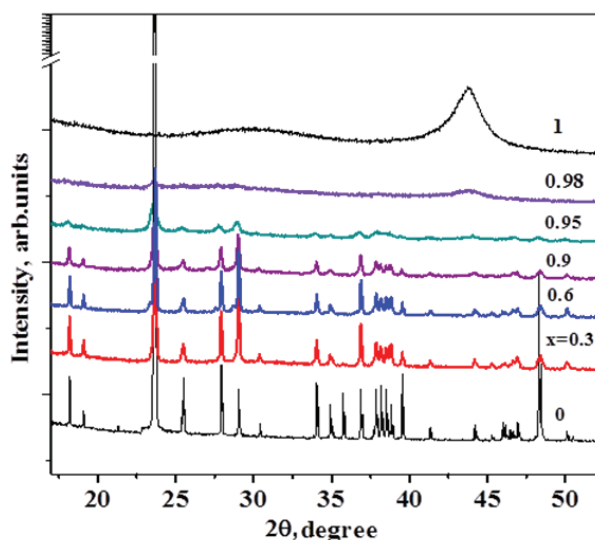
КОМПОЗИЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ CsH_2PO_4 И НАНОАЛМАЗА

Пономарева В.Г., Багрянцева И.Н.

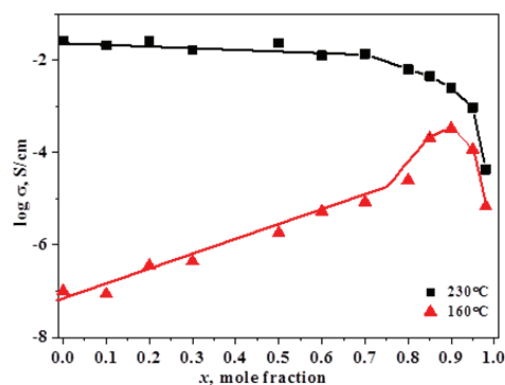
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

ФИЦ «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН»

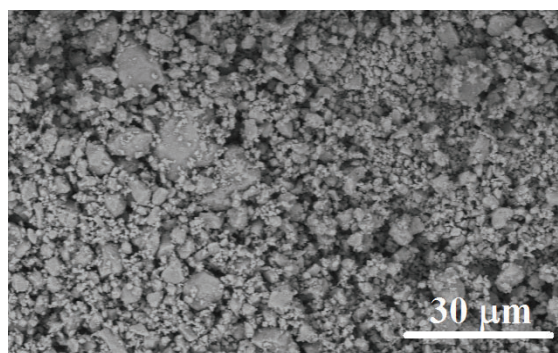
Получены наноконпозиционные системы $(1-x)\text{CsH}_2\text{PO}_4-x\text{ND}$ на основе наноалмазов ($294 \text{ м}^2/\text{г}$) в широком диапазоне составов ($x=0-0.99$). В наноконпозициях структура CsH_2PO_4 сохраняется при сильном диспергировании соли и частичной ее аморфизации с ростом доли наноалмаза. Композиты характеризуются равномерным распределением частиц соли и уменьшением их размера вплоть до 100 - 200 нм даже при малых объемных долях (f_v) ND ($f_v\text{ND} = 1\%$), что важно для получения не только тонкопленочного высокопроводящего протонного электролита, но и высокодисперсных электродных композиций на основе дигидрофосфата цезия для среднетемпературных топливных элементов. Показано, что суперпротонная проводимость наноконпозиций близка к проводимости исходного CsH_2PO_4 вплоть до $x=0,7$ ($f_v\text{ND}=12\%$). Проводимость в низкотемпературной области возрастает на 3,5 порядка с ростом доли наноалмаза, проходя через максимум при $x=0,90$ ($f_v\text{ND}=30\%$).



Рентгенограммы нанокomпозиционных электролитов $(1-x)\text{CsH}_2\text{PO}_4-x\text{ND}$ различных составов.



Изотерма проводимости композитов $(1-x)\text{CsH}_2\text{PO}_4-x\text{ND}$ в зависимости от состава ($T=160, 230^\circ\text{C}$).



Электронная микроскопия образца $(1-x)\text{CsH}_2\text{PO}_4-x\text{ND}$ ($x=0.2$, $\text{fvND}=1\%$).

1. V.G. Ponomareva, I.N. Bagryantseva, E.S. Shutova. Hybrid systems based on nanodiamond and cesium dihydrogen phosphate // Materials Today: Proceedings. 2020. V. 25. P3. P. 521-524.

РЕАКЦИОННО-ДИФфуЗИОННЫЙ СИНТЕЗ МАТЕРИАЛОВ С РЕГУЛЯРНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МИКРОСТРУКТУРОЙ

М.М. Сычев, С.Н. Перевислов, АИ. Макогон, В.Я. Шевченко

Институт химии силикатов им. И.В. Гребениčkова РАН

Осуществлено моделирование реакционно-диффузионных процессов, обеспечивающих формирование материалов с регулярной (периодической) взаимосвязанной микроструктурой. Предложен численный метод решения реакционно-диффузионной системы уравнений Тьюринга. На примере модели Грея-Скотта показано, что при определенных условиях формируется методика моделирования реакционно-диффузионных процессов позволяет определять условия протекания процессов, обеспечивающие формирование регулярных паттернов, в том числе с геометрией трижды периодических поверхностей минимальной энергии (рис. 1).

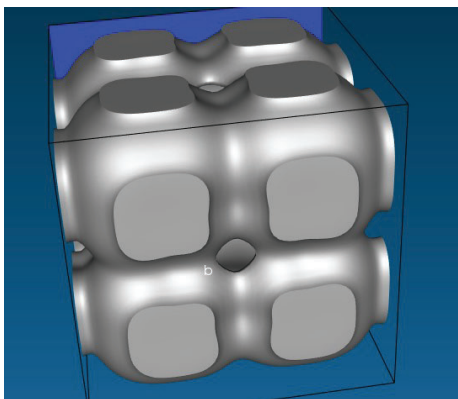


Рис. 1. Формирование в пространстве трижды периодической регулярной структуры в результате реакционно-диффузионных превращений

Путем моделирования впервые описан реакционно-диффузионный механизм формирования SiC в композите алмаз-карбид кремния. Теоретически доказана вероятность образования «забора» Тьюринга на алмазных частицах в условиях рассмотренной реакционно-диффузионной системы.

Полученные результаты могут быть использованы для направленного синтеза материалов нового поколения с проектируемой регулярной микроструктурой, в том числе трижды периодической, и могут стать основой новой технологии материалов с регулируемой (периодической) микроструктурой.

Впервые исследована технология композиционных материалов системы алмаз-карбид кремния, методом реакционно-диффузионного спекания (реакция Тьюринга). Показано, что в неорганических средах взаимодействие некоторых химически сродных компонентов (одними из таких компонентов являются алмаз и карбид кремния) может идти в соответствии с реакционно-диффузионным механизмом Тьюринга, то есть, при определенных условиях (концентрация компонентов, температура процесса, давление среды) можно получать материалы с регулируемой трижды периодической структурой, образующие единый монолитный материал. Показано, что на поверхности алмазных частиц формируются наноразмерные зерна SiC при диффузии газообразного Si в пористую заготовку, а также микронные зёрна SiC, при пропитке расплавом жидкого кремния и растворении частиц пироуглерода и графита на алмазных частицах. Рост повторяющихся слоев частиц SiC на алмазных частицах («забор» Тьюринга (рис. 2а)) приводит к обволакиванию всех алмазных частиц плотными слоями синтезируемого SiC до заполнения всего порового пространства между алмазами, образующими каркас образца, получая монолитный композиционный материал алмаз-карбид кремния (рис. 2б).

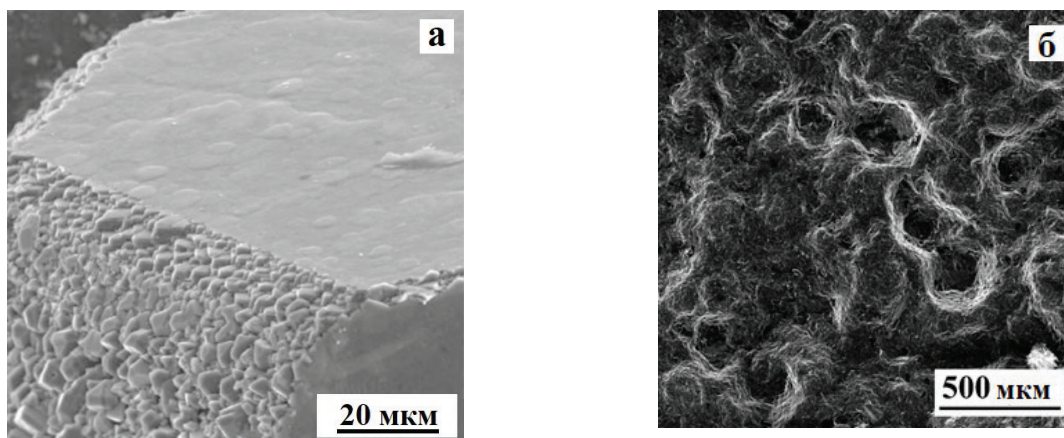


Рис. 2. Формирование микронных зёрен SiC «забора» Тьюринга (а) на поверхности алмазной частицы и слоев карбида кремния (б) в композиционном материале алмаз – карбид кремния

Прорастающие зерна SiC прочно скрепляют каркас из алмазных частиц и позволяют композиту алмаз-карбид кремния обладать максимальными механическими характеристиками, близкими к монолитному материалу (таблица 1).

Таблица 1. Физико-механические характеристики композиционного материала алмаза-SiC

Материал	ρ , г/см ³	E , ГПа	ν , км/с	$\sigma_{изг}$, МПа	K_{IC} , МПа·м ^{1/2}	HV , ГПа
Алмаз-SiC	3,35-3,40	720-780	15,0	420450	4,7-5,3	63-68

ρ – плотность, E – модуль упругости, ν – скорость звука; $\sigma_{изг}$ – прочность при изгибе; K_{IC} – коэффициент трещиностойкости, HV – твердость по Виккерсу

1. V. Ya. Shevchenko. Topological forms of the future of structural chemistry of new substances and materials // Glass Physics and Chemistry. 2020. Vol. 46. No. 5. P. 361–369.
2. Ковальчук М.В., Орыщенко А.С., Шевченко В.Я., Перевислов С.Н. Патент РФ № 2731703 Композиционный материал.

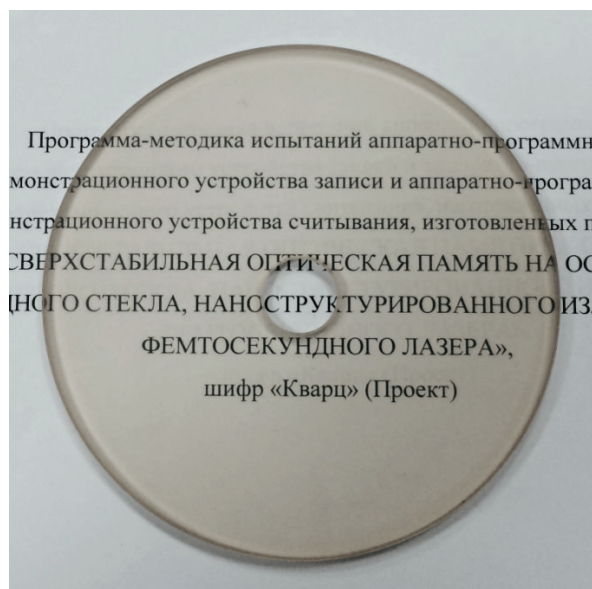
ПРОТОТИП ЦИФРОВОГО НОСИТЕЛЯ ИНФОРМАЦИИ НА ОСНОВЕ НАНОПОРИСТОГО ВЫСОКОКРЕМНЕЗЕМИСТОГО СТЕКЛА

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

Вечное хранение постоянного растущего потока архивных данных без необходимости их периодической перезаписи, их защита от чрезвычайных ситуаций и критических факторов внешней среды является одной из центральных проблем информационных технологий. Решением этой проблемы может стать создание носителя, обладающего стойкостью к внешним воздействиям и неподверженного деградации с течением времени.

В РХТУ им. Д.И. Менделеева выполнен цикл исследований микро- и наномодифицирования структуры широкого класса оксидных стекол фемтосекундным лазерным излучением, приведший к созданию технологии записи, считывания и вечного архивного хранения данных на стеклообразных носителях. Основным материалом для создания вечного носителя на начальном этапе работе рассматривалось кварцевое стекло, характеризующееся наиболее высокой стабильностью свойств, высокой химической, механической и радиационной прочностью, с которыми не могут соперничать другие стекла. В процессе исследований оказалось, что скорость записи данных в случае кварцевого стекла невысока. Она ограничена тем, что для создания уверенно считываемых параметров двулучепреломляющей нанорешетки (фазового сдвига и ориентации медленной оси, жестко связанной с поляризацией падающего пучка) необходимо затратить не менее 50 фемтосекундных импульсов. Это ограничение существенно затрудняет создание успешно коммерциализуемых технологий, и оно в значительной степени преодолено предложенным нами новым материалом носителя - высококремнеземистым нанопористым стеклом. Оказалось, что его применение позволило в значительной степени решить проблему скорости записи и приблизить данную технологию хранения данных к практической реализации. Так, для записи одной двулучепреломляющей структуры в нанопористом стекле требуется не более 3 импульсов [1], а в скором времени специалистами РХТУ им. Д.И. Менделеева была продемонстрирована реализация метода разворачивания одного лазерного импульса в «гребенку» - последовательность импульсов с помощью использования резонаторов по типу резонатора Фабри-Перо. В этом случае для записи двулучепреломляющей структуры требуется всего один исходный лазерный импульс, что выводит скорость записи информации на уровень существующих и широко применяемых технологий оптического

хранения данных [2]. Показано, что двулучепреломляющие микрообласти в нанопористом стекле имеют природу, отличную от природы образования нанорешеток в кварцевом стекле. Они представляют собой полости эллиптического сечения с неравномерно распределенной областью уплотненного стекла вокруг нее [3]. При этом ориентация эллипса обусловлена исключительно ориентацией поляризации записывающего лазерного пучка. Такие структуры могут найти свое применение не только в области архивного хранения данных, но и в микрофлюидике, фотонике и интегральной оптике.



Фотография прототипа носителя данных в виде диска из нанопористого высококремнеземистого стекла, изготовленного в РХТУ им. Д.И. Менделеева.

1. A. S. Lipatiev, S. S. Fedotov, A. G. Okhrimchuk, S. V. Lotarev, A. M. Vasetsky, A. A. Stepko, G. Yu Shakhgildyan, K. I. Piyanzina, I. S. Glebov, and V. N. Sigaev. Multilevel data writing in nanoporous glass by a few femtosecond laser pulses. *Applied optics*, 57(4):978–982, 2018.
2. S. S. Fedotov, A. G. Okhrimchuk, A. S. Lipatiev, A. A. Stepko, K. I. Piyanzina, G. Yu Shakhgildyan, M. Yu Presniakov, I. S. Glebov, S. V. Lotarev, and V. N. Sigaev. 3-bit writing of information in nanoporous glass by a single sub-microsecond burst of femtosecond pulses. *Optics Letters*, 43(4):851–854, 2018.
3. S. S. Fedotov, A. S. Lipatiev, M. Yu Presniakov, G. Yu Shakhgildyan, A. G. Okhrimchuk, S. V. Lotarev, and V. N. Sigaev. Laser-induced cavities with a controllable shape in nanoporous glass. *Optics Letters*, 45(19):5424–5427, 2020.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ И ДОЛГОВЕЧНОСТИ АНТИОБЛЕДЕНИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ РАЗЛИЧНЫХ ПОКРЫТИЙ ДЛЯ АВИАЦИОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ НА ПОВЕРХНОСТЯХ С ИЕРАРХИЧЕСКОЙ ШЕРОХОВАТОСТЬЮ

**Л.Б. Бойнович, К.А. Емельяненко, А.Г. Домантовский, А.М. Емельяненко,
Н.Е. Сатаева, И.Е. Жигулин, Чулкова Е.В.**

Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН

Создание прочных полифункциональных покрытий для конструктивных элементов летательной техники, таких как передняя кромка крыла, подкрылки и фюзеляж, является одной из ключевых задач авиационного материаловедения. Для таких покрытий

устойчивость к различным разрушающим факторам окружающей среды определяет долговечность и эффективность их использования, как противообледенительных покрытий. В данной работе методом лазерной обработки была создана серия супергидрофобных покрытий и подобраны оптимальные условия обработки алюминиевых сплавов, используемых для изготовления деталей самолетов. В результате проведенных исследований решены задачи повышения скорости изготовления супергидрофобных покрытий без потери требуемых функциональных свойств, а также изучены свойства полученных покрытий при различных длительных деструктивных факторах, характерных для открытых атмосферных условий. Проведенный анализ подтвердил возможность значительного ускорения изготовления покрытий на алюминиевых сплавах, обладающих высокой механической и химической стойкостью, что увеличивает ценность этих покрытий для авиационной промышленности. Испытания разработанных покрытий в условиях искусственного обледенения в аэрогидродинамической трубе ЦАГИ показали высокую эффективность в снижении накопления льда на поверхности. Кроме того, обнаружена способность таких покрытий периодически самопроизвольно сбрасывать лед, формирующийся после длительного нахождения покрытия в высокоскоростном потоке, содержащем переохлажденный водный аэрозоль.

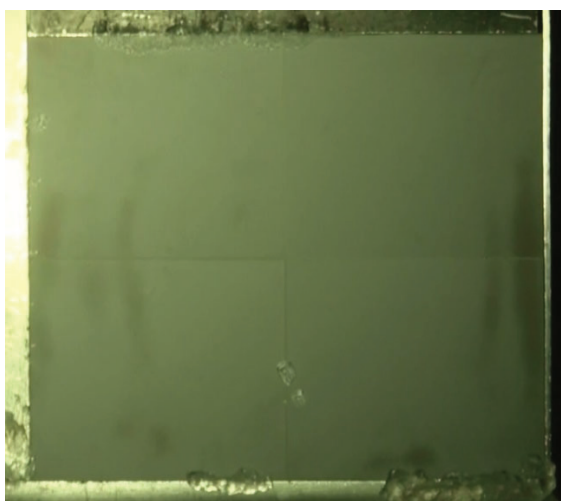
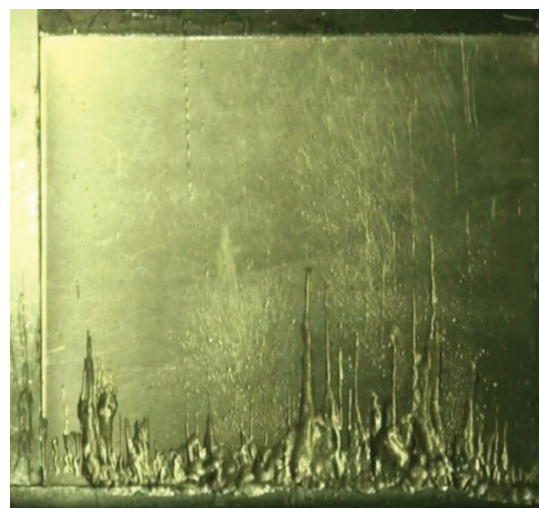
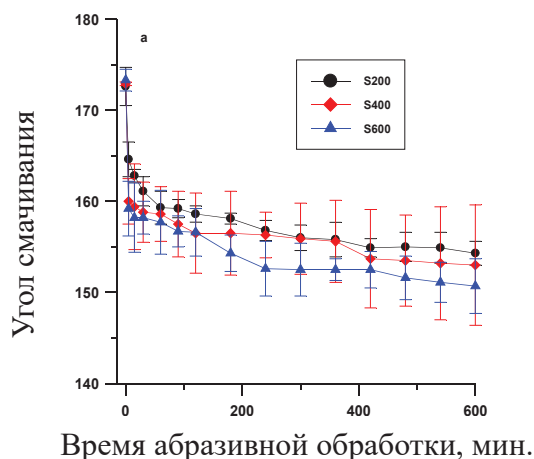


Рис.1. 4-я минута испытаний образца с супергидрофобным покрытием (слева) и без покрытия (справа).

Испытания проводились в аэрогидродинамической трубе ЦАГИ при $T = -15\text{ }^{\circ}\text{C}$, скорости потока переохлажденного водного аэрозоля 50 м/с, водности 1.2 г/м^3



Проведен цикл исследований, показавший высокую стойкость разработанных покрытий к пленочной конденсации, УФ облучению, абразивному износу песком и механическим деформациям в зоне трехфазного контакта, развивающимся при кристаллизации-плавлении воды.

Рис.2 Изменение смачивания покрытий при длительной абразивной обработке.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА АДГЕЗИИ ЛЬДА К РАЗЛИЧНЫМ ПОВЕРХНОСТЯМ

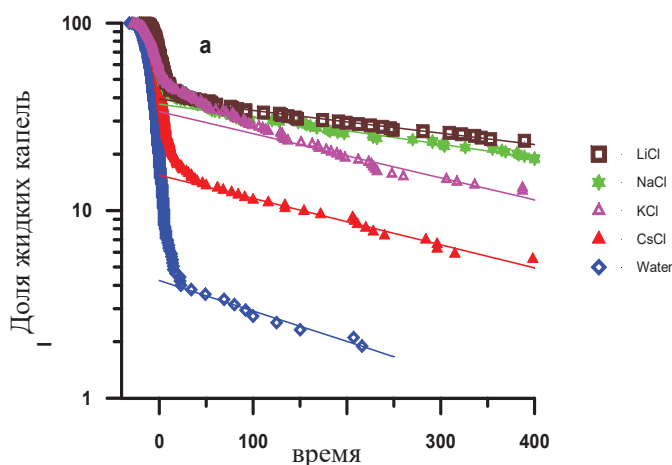
А.М. Емельяненко, Л.Б. Бойнович, К.А. Емельяненко

Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН

Проанализирован механизм адгезии льда к поверхностям, включая супергидрофобные покрытия на металлах и показана роль таких поверхностей в снижении прочности адгезионного контакта льда с материалами. Теоретически проанализировано явление кристаллизации капель водных растворов галогенидов щелочных металлов на супергидрофобных поверхностях и предложен механизм возрастания величины барьера нуклеации вблизи такой поверхности в присутствии космотропных катионов. Проанализирована роль структурной перестройки воды в процессе фазового перехода для молекул, расположенных вблизи супергидрофобной поверхности. Предложенный механизм позволяет объяснить замедление кристаллизации капель водных растворов хлоридов щелочных металлов, в частности морской воды, на супергидрофобных поверхностях при низких отрицательных температурах.

Показано, что времена задержки кристаллизации повышаются при переходе от воды к растворам солей. При этом влияние типа катиона металла на время задержки кристаллизации описывается эффектом Хофмайстера и тем больше, чем выше энергия гидратации катиона.

Рис. 3. Зависимость доли жидких капель при $T = -20\text{ }^{\circ}\text{C}$ для ансамбля сидящих капель полумолярных растворов галогенидов щелочных металлов на супергидрофобной поверхности.



1. Natalia E. Sataeva, Ludmila B. Boinovich, Kirill A. Emelyanenko, Alexandr G. Domantovsky, Alexandre M. Emelyanenko. Laser-assisted processing of aluminum alloy for the fabrication of superhydrophobic coatings withstanding multiple degradation factors. *Surface and Coatings Technology* 397 (2020) 125993.
2. Emelyanenko, A. M.; Emelyanenko, K. A.; Boinovich, L. B. Deep Undercooling of Aqueous Droplets on a Superhydrophobic Surface: The Specific Role of Cation Hydration. *Journal of Physical Chemistry Letters* 2020, 11(8), 3058–3062.
3. Kirill A. Emelyanenko, Alexandre M. Emelyanenko and Ludmila B. Boinovich. Water and Ice Adhesion to Solid Surfaces: Common and Specific, the Impact of Temperature and Surface Wettability. *Coatings* 2020, 10(7), 648. DOI: 10.3390/coatings10070648.
4. Н.Е. Сатаева, К.А. Емельяненко, А.Г. Домантовский, А.М. Емельяненко, Л.Б. Бойнович. Лазерная обработка алюминиевых сплавов для создания атмосферостойких супергидрофобных покрытий. *Российские нанотехнологии* 2020. Т.15. №2. С. 158–163.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СОЗДАНИЯ АНИЗОТРОПНЫХ ДВУМАТРИЧНЫХ
МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ РАДИОТЕХНИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ
С КОНТРОЛИРУЕМЫМ ПРОСТРАНСТВЕННЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ
ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩЕГО И МАГНИТНОГО НАНОРАЗМЕРНЫХ
НАПОЛНИТЕЛЕЙ МЕТОДОМ 3D-ПЕЧАТИ**

**А.Е. Сорокин, И.Д. Краев, Ю.Е. Лебедева, В.А. Воронов, С.А. Ларионов,
С.В. Кондрашов, П.Л. Журавлева, А.А. Беля, А.А. Пыхтин**

***Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов
(ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ)***

Исследована возможность и отработана технология изготовления филаментов, содержащих УНТ модифицированные нековалентные модификаторы (Tego Dispers 690 и MC 51), исследованы их технологические свойства при печати. Определены зависимости характеристик от типа и концентрации модификаторов. Исследована возможность, определены и отработаны режимы 3D-печати темплейтов из полимерных наномодифицированных нитей. Установлено, что введение нековалентных модификаторов, в особенности MC 51, приводит к снижению технологичности при изготовлении филаментов. При этом также проведена оценка прочностных и электрических свойств напечатанных образцов. На основании полученных результатов выбраны оптимальные рецептуры для изготовления полимерных нитей. Выбрана и отработана методика получения порошков сложных никеллатов (керамики типа $\text{La}_{15/8}\text{Sr}_{1/8}\text{NiO}_4$). Схема процесса получения двуматричных материалов приведена на рис. 1.

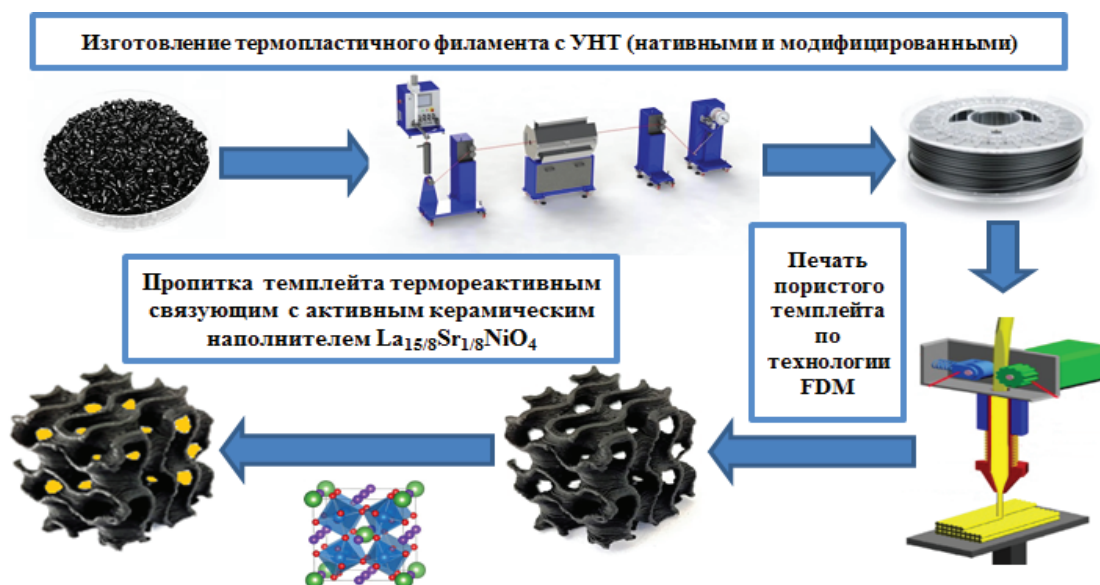


Рисунок 1. Схема процесса создания двуматричного материала с регулируемыми радиофизическими свойствами.

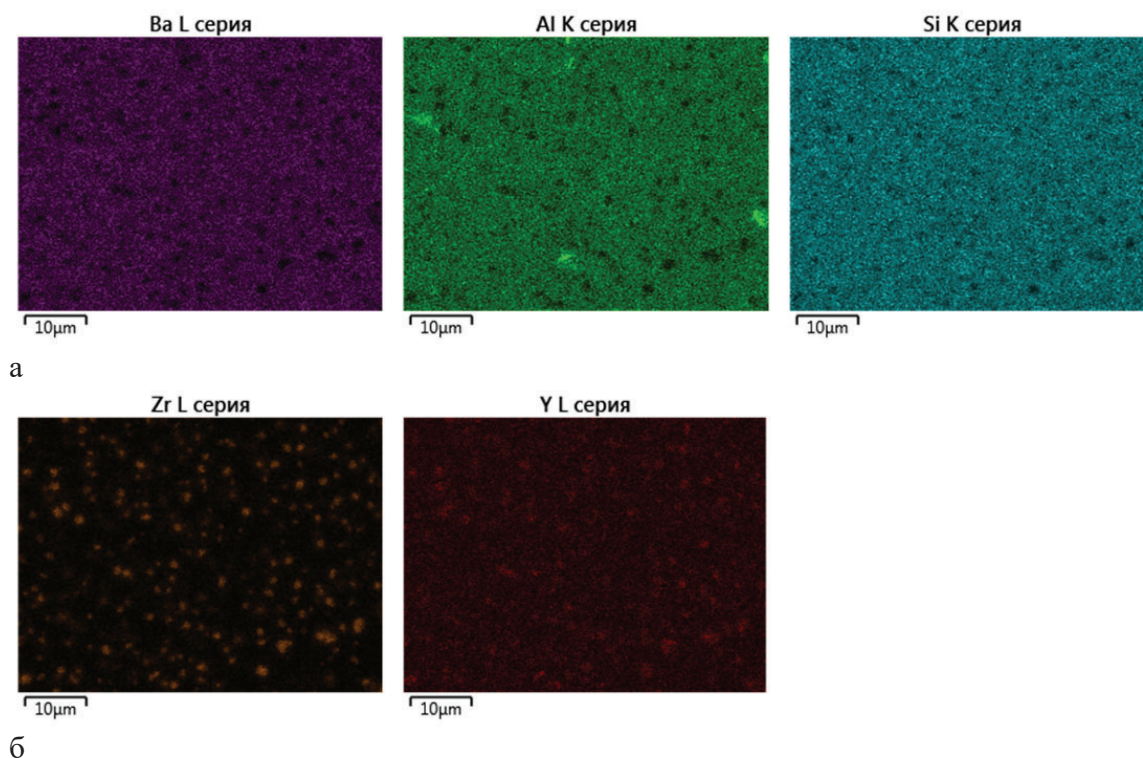
Полученные результаты показали возможность направленного регулирования свойств филаментов для получения материалов с изотропными и градиентными радиофизическими характеристиками. Был предложен подход для получения стабильных дисперсий активных частиц в связующем, который будет использован на третьем этапе для получения систем на основе эпоксидного олигомера и наночастиц карбонильного железа. Использование методики расчета радиофизических характеристик подобных систем показало, что для установления объемной электропроводности и диэлектрической проницаемости аналогичных материалов необходимо провести дополнительные исследования, которые помогут учитывать большее количество факторов оказывающих влияние на свойства получаемых композитов, что в дальнейшем позволит не только прогнозировать, но и оперативно их регулировать.

**УСТАНОВЛЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ВЛИЯНИЯ МОДИФИЦИРУЮЩИХ
ОКСИДОВ ЦИРКОНИЯ И ГАФНИЯ НА ПРОЦЕССЫ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ,
СПЕКАНИЯ, СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА АЛЮМОСИЛИКАТНОЙ СТЕКЛОКЕРАМИКИ,
ПОЛУЧЕННОЙ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ**

А.С. Чайникова, Н.Е. Щеголева, В.С. Ковалева, И.О. Беляченков, А.А. Качаев
Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов

С применением золь-гель метода синтезирована стеклокерамика на основе систем $RO-Al_2O_3-SiO_2$ ($R = Sr, Ba$), модифицированная добавками ZrO_2 и HfO_2 в присутствии и без стабилизирующего оксида иттрия. Выявлены зависимости между химическим, фазовым составом, структурой и свойствами барий- (BAS) и стронцийалюмосиликатной (SAS) стеклокерамики, модифицированной оксидами циркония и гафния в присутствии и без стабилизирующего оксида иттрия.

Установлено, что введение тугоплавких оксидов способствует повышению прочности стеклокерамики ввиду снижения содержания остаточной стеклофазы в ее составе. Модификация оксидом циркония способствует повышению критического коэффициента интенсивности напряжений (K_{IC}) стеклокерамики более, чем в 2,3 раза. Так, при введении 15 мас.% ZrO_2 и K_{IC} увеличивается в 2,3 раза и в 2,4 раза – для образцов стеклокерамики SAS и BAS, соответственно. Показано, что увеличение значения K_{IC} при введении ZrO_2 реализуется за счет действия механизма трансформационного упрочнения, что подтверждено по результатам качественного и количественного РФА поверхности образцов до и после приложения нагрузки. Так, показано, что для SAS и BAS стеклокерамики соотношение содержания тетрагональной и моноклинной фаз $t-ZrO_2/m-ZrO_2$ (t/m) после приложения нагрузки снижается на 51-71 % и 53-74 %, соответственно, что свидетельствует о фазовом переходе $t-ZrO_2 \rightarrow m-ZrO_2$. При этом степень снижения t/m коррелирует со значением K_{IC} , содержанием и природой добавок. Показано, что введение стабилизирующего оксида иттрия затрудняет мартенситный переход $t \rightarrow m-ZrO_2$.



Результаты СЭМ (а) и сканирования по площади методом электронно-зондового микроанализа (б, Ba – розовый, Al – зеленый, Si – голубой, Zr – оранжевый, Y – красный) образца стеклокерамики BAS, содержащего ZrO_2 в сочетании с оксидом иттрия

Применение золь-гель метода позволило обеспечить равномерное распределение частиц тугоплавких оксидов циркония и гафния в объеме стеклокерамики (рис. 1). Оксид иттрия при этом сконцентрирован вблизи оксида циркония, что свидетельствует о его действии как стабилизатора тетрагональной формы ZrO_2 .

Установлено, что модифицированная стеклокерамика характеризуется стабильностью структуры и фазового состава при воздействии высоких температур ($\geq 1500^\circ\text{C}$). Это обусловлено преобладанием в их фазовом составе высокотемпературных форм моноклинного стронциевого анорита и монокельзиана. Однако введение оксида гафния затрудняет образование монокельзиана в ходе кристаллизации барийалюмосиликатной стеклокерамики, что приводит к присутствию в их фазовом составе некоторого количества нежелательной метастабильной формы гексацельзиана.

1. Каблов Е.Н., Чайникова А.С., Щеголева Н.Е., Гращенков Д.В., Ковалева В.С., Беляченков И.О. Синтез, структура и свойства алюмосиликатной стеклокерамики, модифицированной оксидом циркония // Неорганические материалы. 2020. Том 56. № 10. С. 1123-1129.
2. Chaynikova A.S., Kovaleva V.S., Zabelin D.A., Belachenkov I.O., Modin S.Y.) Modification of barium aluminosilicate glass-ceramics with zirconium oxide additives // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2020. № 848 012013.
3. Чайникова А.С., Щеголева Н.Е., Ковалева В.С., Беляченков И.О., Журавлева П.Л., Житнюк С.В., Гращенков Д.В. Исследование процессов фазообразования и формирования структуры при синтезе золь-гель методом стронцийалюмосиликатной стеклокерамики, модифицированной тугоплавким оксидом циркония / В сб. Материалы XII Всероссийской конференции «ТестМат» по тематике «Современные аспекты в области исследований структурно-фазовых превращений при создании материалов нового поколения» (г. Москва, 07.02.2020). – М.: ВИАМ, 2020. – 489 с. с. 380-389 (2020 г.)

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ FDM ПЕЧАТИ НАНОКОМПОЗИТОВ
НА ОСНОВЕ ПОЛИОЛЕФИНОВ И НАНОРАЗМЕРНОГО ВОЛОКНА ОКСИДА
АЛЮМИНИЯ NAFEN, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ *IN SITU* ПОЛИМЕРИЗАЦИИ С
АППРЕТИРОВАНИЕМ ВОЛОКНА**

**С.В. Кондрашов, С.А. Ларионов, С.Л. Лонский, Ю.А. Сапего, А.А. Пыхтин,
П.Л. Журавлева, И.В. Жарков, С.Л. Саратовских, Н.М. Бравая, А.Н. Панин**
*Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов
Институт проблем химической физики РАН*

В настоящее время развитие аддитивных технологий (АТ), в частности FDM (fused deposition modeling) печати, является одним из ключевых направлений. Данный процесс делает необходимым использование в качестве сырья для FDM -печати не только традиционных матриц, но и высокопрочных и термостойких полимеров, в том числе частично-кристаллических: полиэфиримид, полифениленсульфид, полифениленсульфон, полиэфирэфиркетон. Однако выяснилось, что при использовании таких материалов для печати происходит существенная деформация изделия.

Для предотвращения коробления можно использовать три подхода.

1. Выбор режима печати. Выравнивание температуры формирования верхних и нижних слоев приведет к снижению эффекта коробления. Этого можно достигнуть путем увеличения скорости движения сопла, что приведет к интенсификации теплообмена между слоями или подогревом рабочего стола, на поверхности которого происходит печать. Показано, что использование таких режимов позволяет уменьшить прогиб

напечатанной детали из полиэтилена в 3-4 раза. Использование режимов печати, описанных выше, приводит к увеличению температуры изготавливаемой детали, а следовательно к более глубокой релаксации ориентированного состояния. Следствием этого является снижение сжимающих напряжений и уменьшение относительного удлинения детали при растяжении. Таким образом, требования достижения малой усадки и высоких механических свойств являются противоречивыми.

2. Изменение состава полимерной матрицы. Свойства вязкоупругого тела (в том числе и расплав полимера) могут быть охарактеризованы модулем накопления G' (упругие свойства расплава) и модулем потерь G'' (диссипативные свойства), а также их соотношением - тангенсом угла механических потерь $\tan(\delta)=G''/G'$. Величина $\tan(\delta)$ будет определять глубину релаксации ориентированного состояния, а, следовательно, и величину усадки. Это объясняет установленный в данной работе факт улучшения качества деталей и уменьшение усадки при возрастании $\tan(\delta)$ в ряду полиэтилен, пропилен, сополимер этилена пропилена, напечатанных при одном и том же технологическом режиме.

3. Использование наполненных полимерных матриц. Уменьшение усадки наполненных полимерных матриц является хорошо известным фактом. Однако, существенного уменьшения усадки удастся добиться лишь при использовании высоконаполненных систем более 10 масс.%. Это приводит к существенному уменьшению физико-механических свойств. Установлено, что наполнение полиолефинов волокном оксида алюминия, на поверхность которого химически привиты молекулы катализатора полимеризации, позволяет получить наполненные системы с более высоким уровнем физико-механических свойств по сравнению с исходным материалом.

1. Кондрашов С.В., Пыхтин А.А., Ларионов С.А., Сапего Ю.А., Бравая Н.М., Жарков И.В., Саратовских С.Л., Панин А.Н. Исследование возможности использования полиолефинов и сополимеров на их основе для FDM-печати // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2020. №3. с 23-32.
2. Кондрашов С.В., Пыхтин А.А., Ларионов С.А., Сорокин А.Е. Влияние технологических режимов FDM-печати и состава используемых материалов на физико-механические характеристики FDM моделей // Труды ВИАМ. 2019. № 1 (82). с. 34-49.

МЕТАЛЛОПОЛИМЕРНЫЕ ГИДРОГЕЛИ С САМОВОССТАНАВЛИВАЮЩИМИСЯ СВОЙСТВАМИ

Р.К. Баймуратова, В.А. Шершнев, В.А. Лесничая, Г.И. Джардималиева
Институт проблем химической физики РАН

Полимерные гидрогели, содержащие ионные и водородные связи, потенциально обладают способностью самозаживления. В таких супрамолекулярных системах ковалентные связи служат основой создания первичной структуры, отвечающие за целостность гидрогелей, в то время как нековалентные связи (например, водородные связи, координационные связи и гидрофобные взаимодействия) действуют как жертвенные связи, которые могут обратимо разрушаться и реформироваться, и в результате таких процессов механические характеристики поврежденных систем могут восстанавливаться.

Разработано два подхода к созданию металлосупрамолекулярных полимеров, формирующихся посредством металл-лигандного комплексообразования. Это оригинальный одностадийный способ (со)полимеризации металлосодержащих мономеров на основе комплексов терпиридина и двухстадийный способ, включающий получение хелатирующих полимеров путем (со)полимеризации виниловых мономеров на первой стадии с последующим связыванием ионов металлов путём формирования координационной связи металл-полимерный лиганд (рис. 1).

Впервые на примере би- и оксополиядерных акрилатов переходных металлов Cu(II), Ti(IV), Zr(IV) методом РСА установлено, что введение терпиридинового лиганда приводит к мономеризации структуры непердельного карбоксилата, а в случае итаконатного комплекса Co(II) происходит перегруппировка пространственного строения карбоксилата металла и итаконатный анион становится внешнесферным лигандом. Методом РСА расшифрована молекулярная структура комплекса CoItaconatePhtryH₂O (рис. 2а).

В ходе экспериментов было установлено, что полученные тройные сополимеры акриловой кислоты и акриламида с металлосодержащим терпиридиновым сомономером [AAm]:[AAc]:[CuCinnamatePhtry] не только обладают высокой деформативностью и эластичностью, но и проявляют способность к самовосстановлению. Как показано на рис. 2б, место разреза самовосстанавливается, образуя целостный исходный образец. Соплимеры акриловой кислоты и акриламида, полученные в присутствии хитозана и обработанные раствором FeCl₃, менее эластичны, но лучше поддаются формовке, и также обладают самовосстанавливающимися свойствами.

Использование самовосстанавливающихся полимеров – один из перспективных способов решения проблем с изнашиванием батарей, полевых транзисторов, датчиков, электронной кожи. Долговечность особенно важна для солнечных элементов и других устройств сбора энергии, которые используются, например, в беспроводных сенсорных сетях и рассчитаны на длительные сроки службы. При этом существуют примеры введения самовосстанавливающихся материалов непосредственно в устройство. Кроме того, самовосстанавливающиеся материалы имеют возможность применения в биомедицинских технологиях.

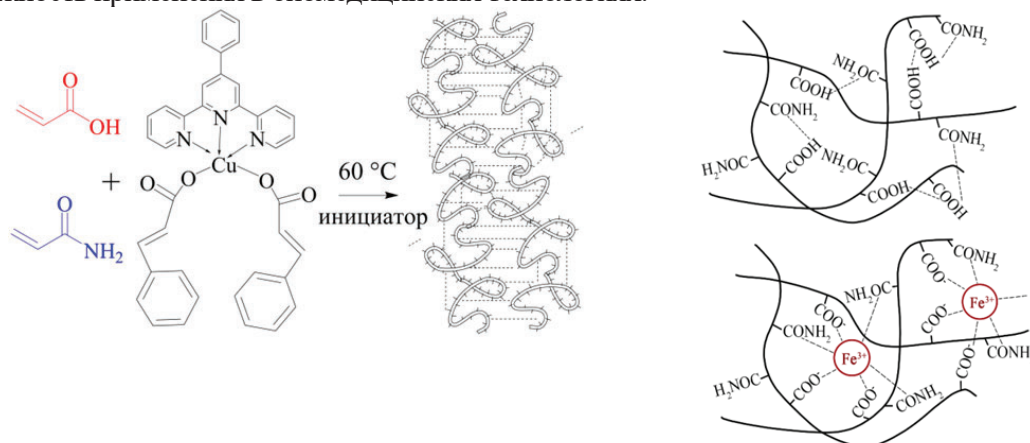


Рисунок 1. Формирование системы межмолекулярных взаимодействий в металлосополимерах: а) тройном сополимере акриловой кислоты, акриламида и терпиридинового комплекса цинната меди, б,в) сополимере акриловой кислоты, акриламида, обработанного водным раствором FeCl₃.

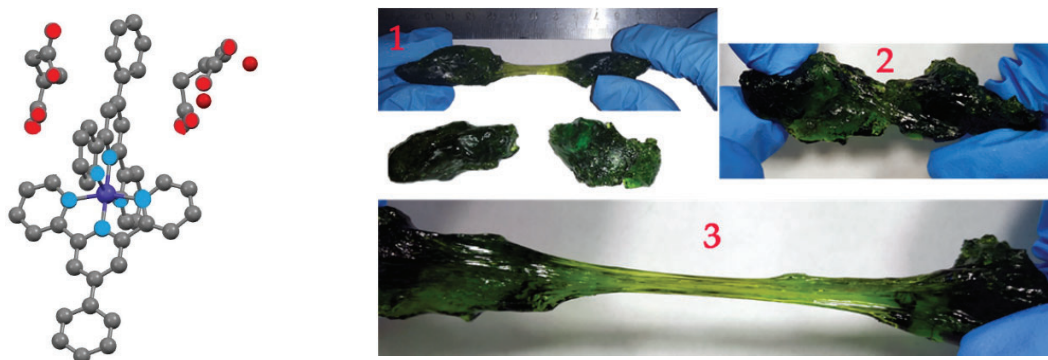


Рисунок 2. а) Структура CoItaconatePhtryH₂O; б) Исследование самозаживления [AAm]:[AAc]:[CuCinnamatePhtry]: 1 – растяжение и разрыв, 2 – совмещение двух частей гидрогеля, 3 – растяжение залечившегося образца.

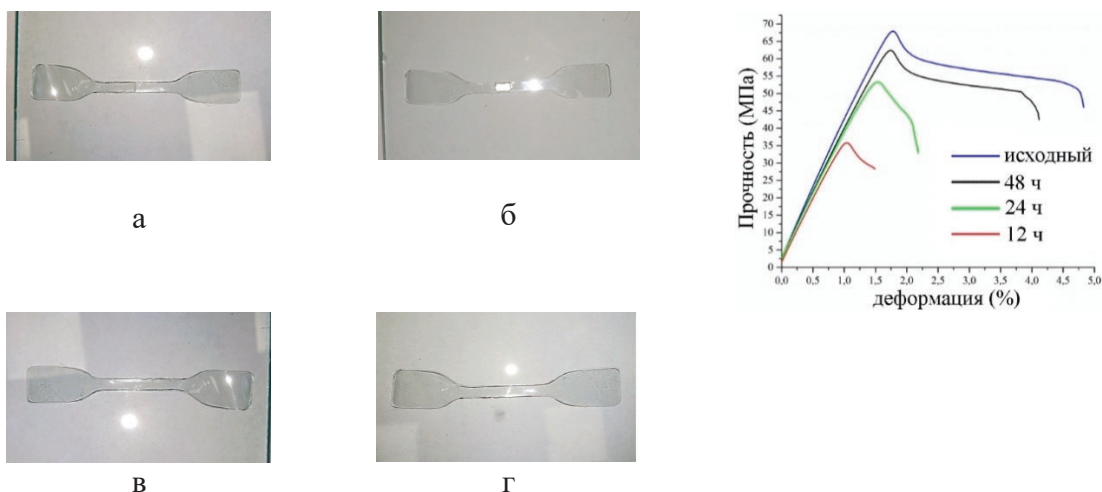
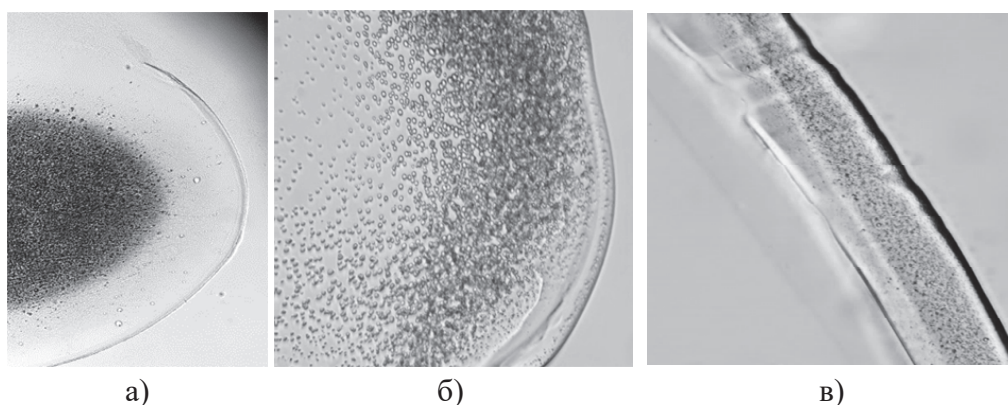


Рисунок 3. Подготовка образцов для физико-механических испытаний: а) исходный, б) разрезанный, в) капля 1N HCl в месте разреза, г) восстановленный по прошествии 48 ч образец; д) кривые прочность – деформация для исходного и восстановленных образцов в зависимости от времени восстановления.

ПОЛИМЕРНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ С ГРАДИЕНТНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОЧАСТИЦ, ВЫЗВАННЫМ КОНТРОЛИРУЕМЫМИ РЕЖИМАМИ ТЕЧЕНИЯ

В.Г. Куличихин, И.Ю. Скворцов, Л.А. Варфоломеева
Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН

Обнаружено градиентное распределение кремнийорганических частиц по сечению волокна, обусловленное диффузионными процессами: коагулянта внутрь струи раствора ПАН при мокром формовании (а) и растворителя на периферию волокна при механотропном формовании (б, в). Термолиз вызывает трансформацию кремнийорганической фазы в карбидокремниевую, что позволяет получать новый вид углеродных волокон либо с карбидокремниевой сердцевиной, либо с защитной оболочкой из карбида кремния, предохраняющей от окисления



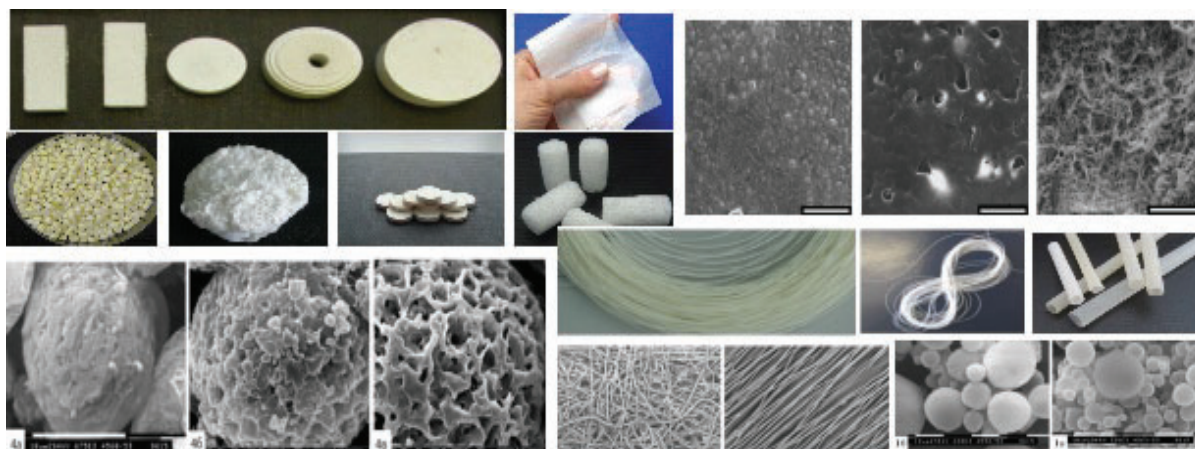
1. Kulichikhin, V. G., Skvortsov, I. Y., Varfolomeeva, L. A. (2020). Compositions Based on PAN Solutions Containing Polydimethylsiloxane Additives: Morphology, Rheology, and Fiber Spinning. *Polymers*, 12(4), 815.

БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ БИОМАТЕРИАЛОВ, КОМПОЗИТОВ И КОНСТРУКЦИЙ НА ИХ ОСНОВЕ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА РЕКОНСТРУКТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Е.И. Шишацкая, Т.Г. Волова

Институт биофизики СО РАН (обособленное подразделение ФИЦ «КНЦ СО РАН»)

Возможность нелимитированного синтеза разрушаемых микробных биопластиков (полигидроксиалкантов, ПГА) различного химического состава и реализованные методы процессинга полимеров (3D печать, электроспиннинг, техника микродропинга и испарения растворителей) позволили сконструировать серию высокотехнологичных изделий биомедицинского назначения (Рис.): микро- и наноносители для доставки лекарственных препаратов, матриксы для клеточной и тканевой инженерии; резорбируемые урологические стенты, не подверженные инкрустации солями и микробному пленкообразованию и эффективные для дренирования анастомоза верхних мочевых путей; атравматичные биотехнологические дермальные эквиваленты в виде нетканых матриксов из эластичного сополимера β,γ -гидроксибутирата в композиции с бактериальной целлюлозой, несущие лекарственные препараты и клетки фибробластического ряда, эффективно восстанавливающие модельные ожоги 2-3 степени и длительно незаживающие гнойные раны кожных покровов; имплантаты для реконструктивного остеогенеза из β -гидроксибутирата, обработанные лазерной резкой и несущие остеобласты, дифференцированные из МСК жировой ткани, которые эффективны для реконструктивного остеогенеза в челюстно-лицевой хирургии и краниопластике. На лабораторных животных с модельными повреждениями тканей показана высокая эффективность применения изделий всех типов.



Образцы полимерных изделий из резорбируемых биопластиков (микробных полигидроксиалканатов, ПГА), разработанные в Институте биофизики СО РАН; защищены патентами РФ на изобретения, Техническими условиями и сертификатами соответствия, зарегистрированными органами Росстандарта РФ.

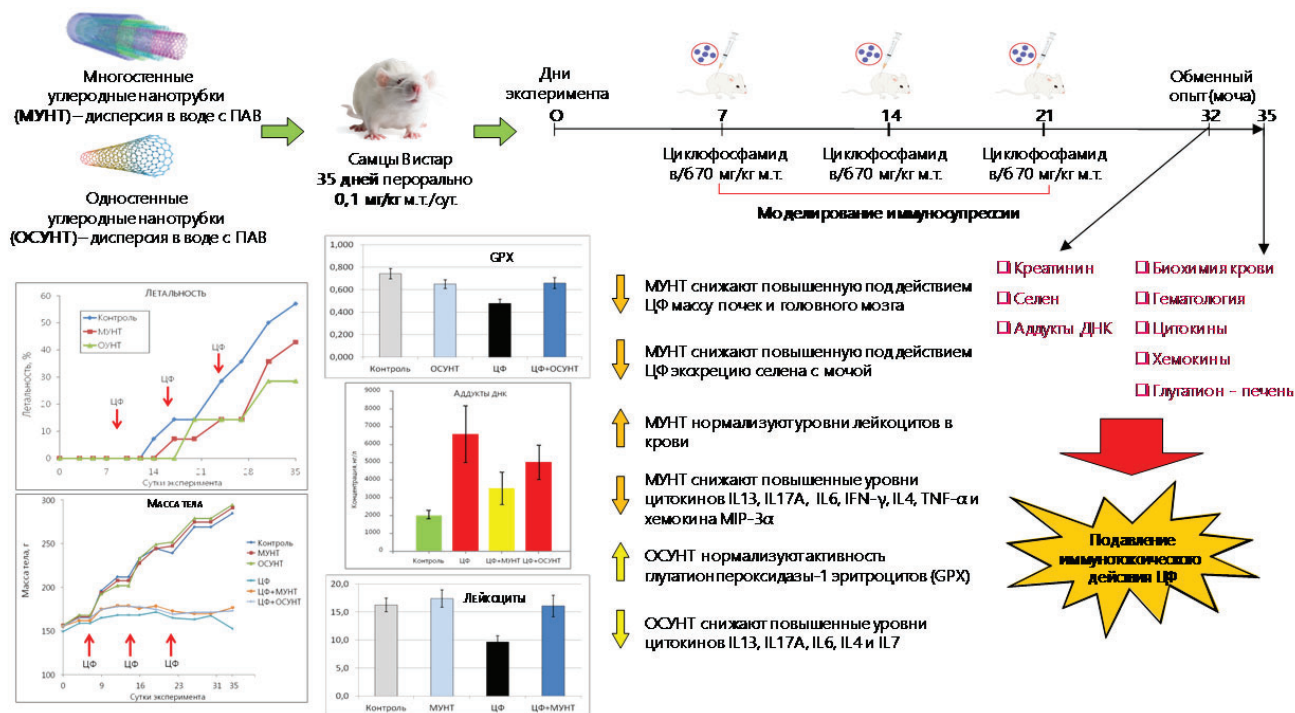
1. E. Shishatskaya, I.Nemtsev, A.Lukyanenko, A. Vasiliev, E. Kiselev, A.Sukovatyi, T.Volova. Polymer Films of Poly-3-hydroxybutyrate Synthesized by *Cupriavidus necator* from Different Carbon Sources //Journal of Polymers and the Environment-2020. <https://doi.org/10.1007/s10924-020-01924-3>
2. T.Volova, E. Shishatskaya, N. Zhila, E. Kiselev. Hydrogen-oxidizing producers of polyhydroxyalkanoates: synthesis, properties, application in: «The Handbook of Polyhydroxyalkanoates» (Ed. Martin Coller)- Taylor&Francis: CRC Press- ISBN 9780367275594 - 2020-472стр.
3. E.I. Shishatskaya, S.V. Prudnikova, A.A. Shumiliva, T.G. Volova. “Bacterial nanocellulose: synthesis, properties, hybrids with nano-silver for tissue engineering” в

УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НОСИТЕЛИ ЦИТОСТАТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ В ХИМИОТЕРАПИИ

И.В. Гмошинский, Н.А. Ригер, В.А. Шипелин, А.А. Шумакова, Э.Н. Трушина,
О.К. Мустафина, С.А. Хотимченко

ФИЦ питания, биотехнологии и безопасности пищи

Впервые показано, что при сочетанном введении углеродных наноматериалов - многостенных и одностенных углеродных нанотрубок вместе с алкилирующим цитостатическим агентом циклофосфамидом (ЦФ) в организм крыс значительно снижается летальность животных, вызванная действием ЦФ, а также подавляются проявления его иммунотоксического действия, что находит отражение в ослаблении лейкопении и восстановлении до близких к нормальным значениям уровней цитокинов и хемокинов/ростовых факторов, включая IL-4, IL-13, IL-17A, IFN- γ , IL-18, GM-CSF, GRO-KC, IL-12p70, IL-1 β , IL-7, TNF- α и VEGF. Полученные экспериментальные данные показывают, что углеродные нанотрубки обладают способностью в значительной мере блокировать развитие «цитокинового шторма», развивающегося в виде вторичного побочного эффекта, определяемого цитотоксическим действием ЦФ при его использовании в химиотерапии злокачественных опухолей. Это создает определенные перспективы применения углеродных нанотрубок в качестве носителей препаратов – цитостатиков, что может повысить избирательность лечения и снизить число осложнений при проведении химиотерапии.



1. Gmshinski I.V., Riger N.A., Shipelin V.A., Shumakova A.A., Trushina E.N., Mustafina O.K., Khotimchenko S.A. The effect of carbon nanomaterials on the toxicity indices of cyclophosphamide under combined administration // Nanotechnologies in Russia Q2. 2020. Vol. 15, No. 2. P. 218–229. DOI: 10.1134/S1995078020020093

ПРИЛОЖЕНИЯ

**Презентация доклада Первого заместителя генерального директора АО «Наука и инновации» ГК "Росатом", д.т.н., профессора Алексея Владимировича Дуба
«О потребностях и проблемных вопросах в области материалов
и наноматериалов, необходимых для решения стратегических задач»**



18 МАРТА 2020 / «ПРЕЗИДИУМ РАН»

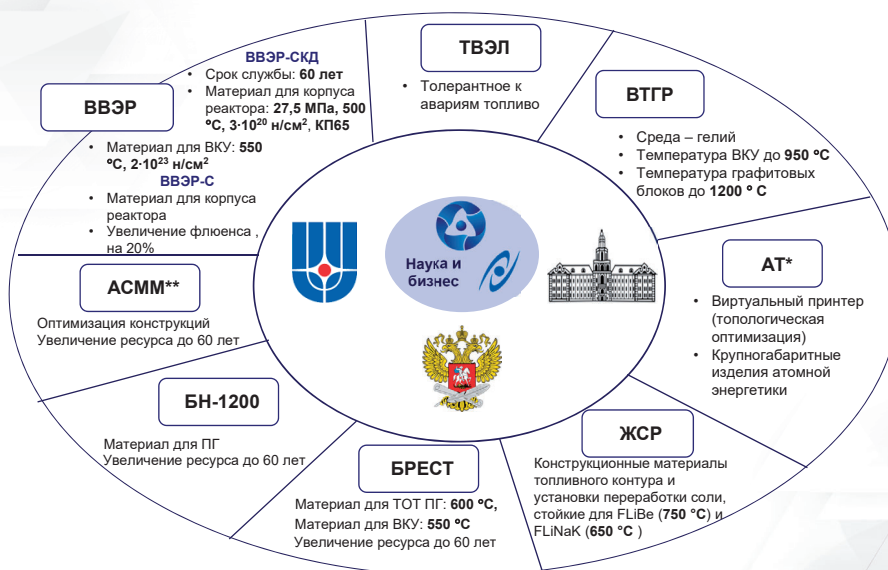
**О потребностях и проблемных вопросах в области
материалов и наноматериалов, необходимых для
решения стратегических задач Госкорпорации
«Росатом»**



Дуб Алексей Владимирович,
Первый заместитель генерального директора АО «Наука и инновации»

Заседание в РАН

**1. Основные задачи по разработке новых материалов
для перспективных проектов**



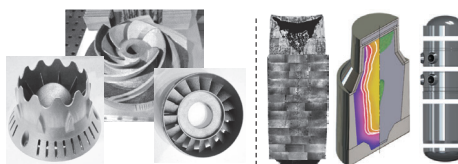
* Аддитивные технологии.
** Атомные станции малой мощности

2. Классификация структурных уровней



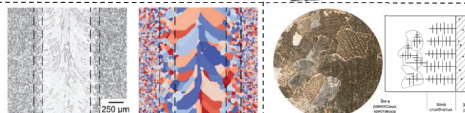
МАКРОУРОВЕНЬ
ИЗДЕЛИЕ ИЛИ ЗАГОТОВКА

более 10^{-2} м



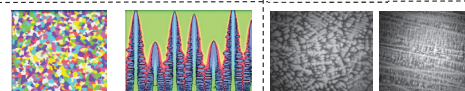
МЕЗОУРОВЕНЬ
СЛОЙ/МАКРОЗЕРНА

$10^{-5} - 10^{-2}$ м



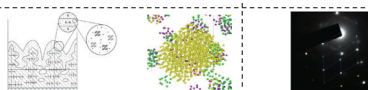
МИКРОУРОВЕНЬ
ЗЕРЕННАЯ СТРУКТУРА

$10^{-7} - 10^{-5}$ м



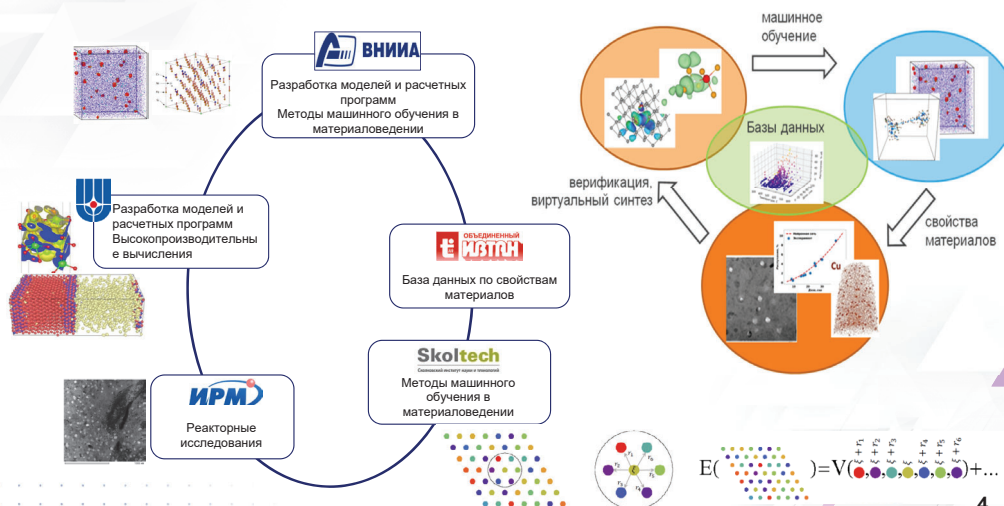
НАНО (АТОМАРНЫЙ)
УРОВЕНЬ

$10^{-10} - 10^{-7}$ м



3

2.1 Компьютерное материаловедение – «генезис материалов»

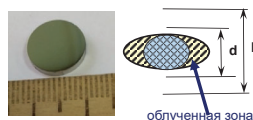


4

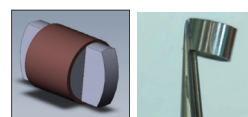
2.2 Ускоренные имитационные исследования радиационной повреждаемости конструкционных материалов (методика)



Для материалов крупногабаритных элементов конструкций



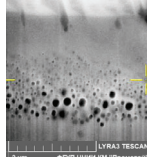
Для материалов тонкостенных трубок (оболочек ТВЭЛов)



Сравнение распухания для материалов одного класса (аустенитные стали)

Оценка радиационного распухания сталей 10X16H25MT и 08X18H10T для ВКУ ВВЭР-ТОИ

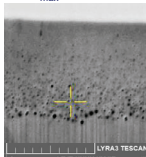
$D_{max} = 108$ сн



$S_w = 20-25\%$

Сталь 08X18H10T

$D_{max} = 108$ сн



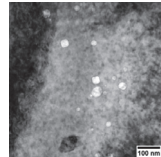
$S_w = 5-9\%$

Сталь 10X16H25MT

Сравнение распухания для материалов разного класса (феррито-мартенситная и аустенитная стали)

Оценка радиационного распухания материалов оболочек ТВЭЛов

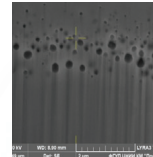
$D_{max} = 250$ сн



$S_w = 2\%$

Сталь ЭП823 (феррито-мартенситная)

$D_{max} = 250$ сн



$S_w = 18-20\%$

Сталь ЗК164 (аустенитная)

5

2.2.1 Материалы для ВКУ ВВЭР-СКД

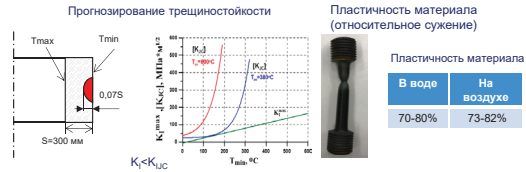


Отбор кандидатных материалов для
Тобл = 400-550 °С

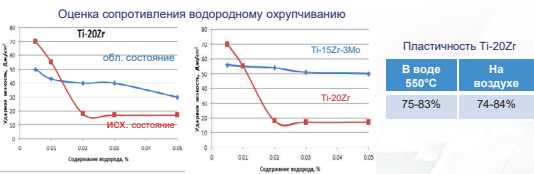


Результаты имитационных исследований материалов, облученных в ионном ускорителе

Оценки работоспособности стали
07X12NMФБ



Оценки работоспособности титановых сплавов



Сопротивление хрупкому разрушению и коррозионная прочность обеспечены после ионного облучения до 200 сна

6

3. Обеспечение свойств изделий/проектных характеристик



Выбор материаловедческих и технологических решений, обеспечивающих получение наиболее благоприятной структуры и комплекса служебных и технологических свойств.



1. Оптимизация содержания основных легирующих элементов

- Оптимизация содержания примесей/ вредных элементов

2. Оптимизация морфологии упрочняющих фаз (в т.ч. НВ)

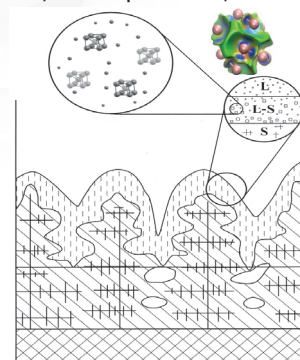
- Получение требуемой / мелкозернистой структуры
- Микролегирование и модифицирование
- Обеспечение категории прочности КР150-КР165
- Увеличение максимальной температуры эксплуатации до 350-400 °С
- Обеспечение ресурса корпуса реактора более 80 лет

7

3.1 Микро и субмикро – кластерный механизм роста



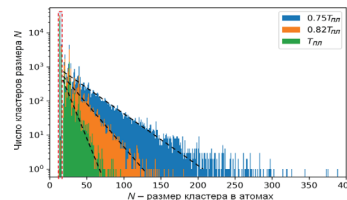
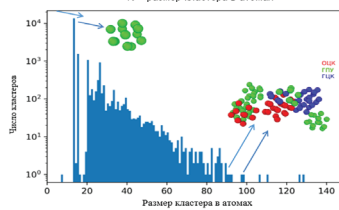
Общая схема кристаллизации металла



S – зона полностью упорядоченных атомов (твёрдое состояние)

L-S – зона кластеров и разупорядоченных атомов (предкристаллизационный слой)

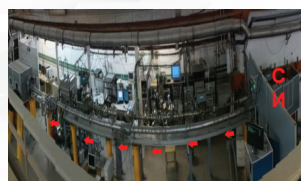
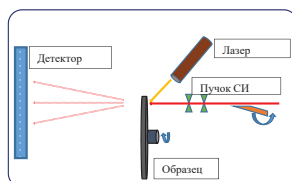
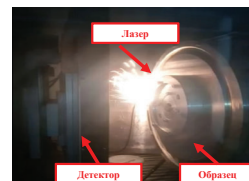
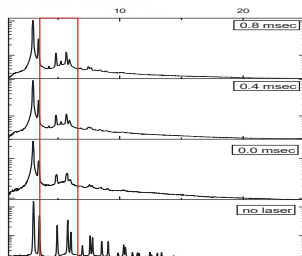
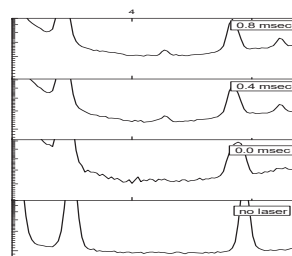
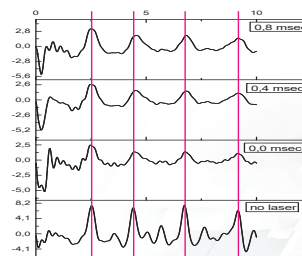
L – зона полностью разупорядоченных атомов (жидкое состояние)



Распределение кластеров по размерам для T = T_{пл}

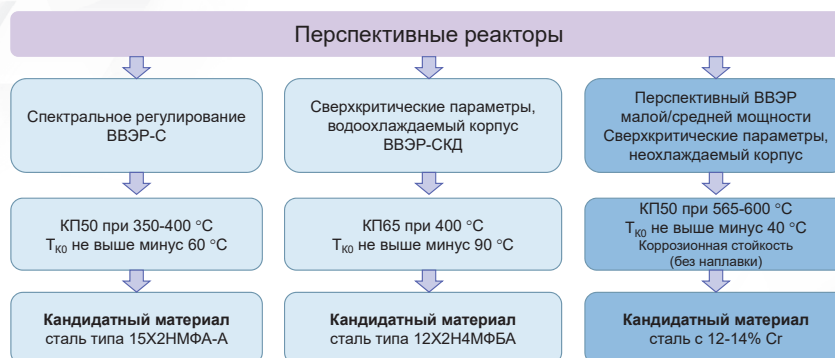
8

3.2 Исследование процессов затвердевания



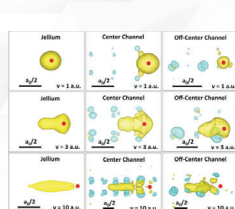
9

4. Корпусные материалы ВВЭР



10

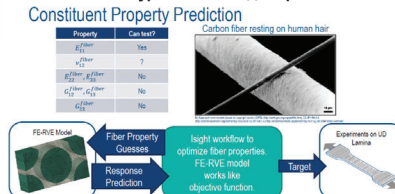
5. Конструкционные материалы толерантного топлива



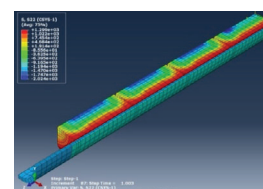
Микроуровень
электроны, атомы, дефекты

Многоуровневое моделирование

Constituent Property Prediction



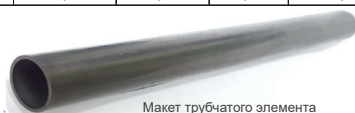
Мезоуровень
филаменты, поры



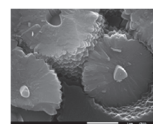
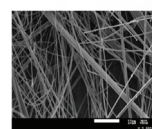
Макроуровень
конструкция изделия

Образцы элементов конструкций из композита SiC/SiC

Длина, мм	Наружный диаметр, мм	Внутренний диаметр, мм	Толщина стенки, мм	Шероховатость
100,12	11,02	9,54	0,74	0,8

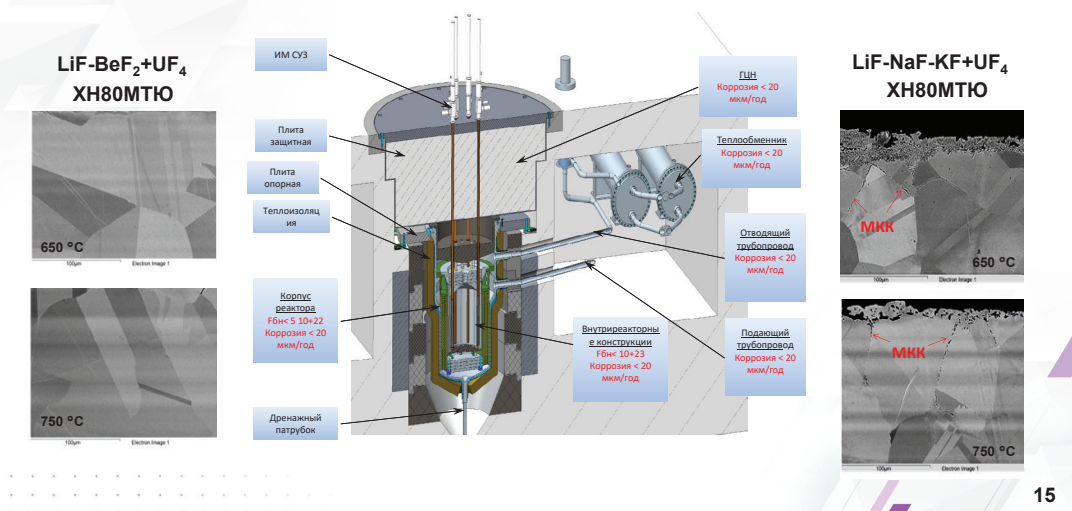


Макет трубчатого элемента



11

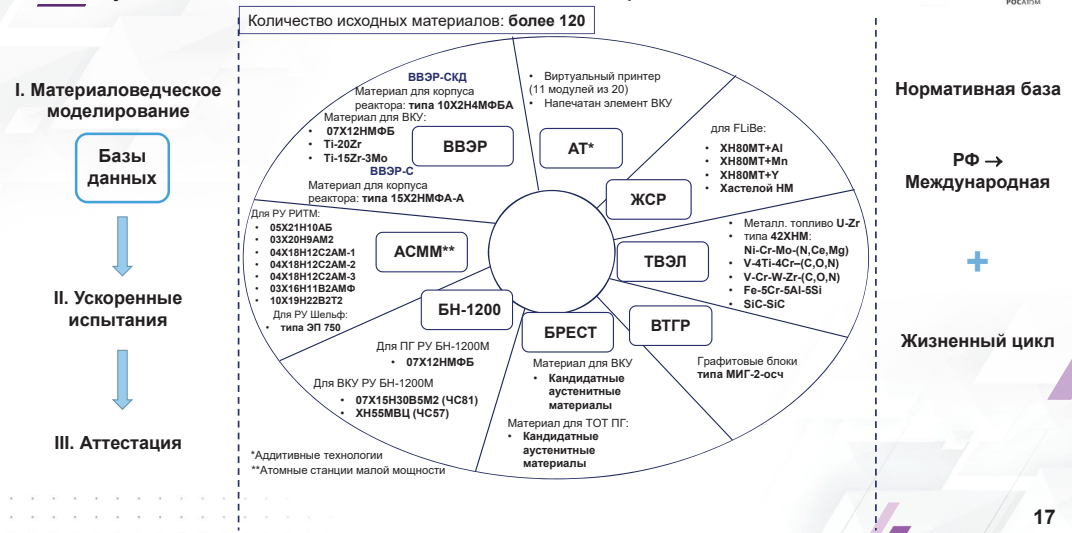
7. Конструкционные материалы для ЖСР



Направление углеродных и композиционных материалов



8. Результаты 2019 года – кандидатные материалы



Презентация доклада научного руководителя проектного направления «Прорыв», научного руководителя АО «Ордена Ленина Научно-исследовательский и конструкторский институт энерготехники имени Н.А. Доллежала» (АО «НИКИЭТ»), д.т.н., профессора Евгения Олеговича Адамова о проблемах конструкционных материалов для реакторов на быстрых нейтронах и объектов замкнутого топливного цикла



Научный совет РАН по материалам и наноматериалам

ГОСУДАРСТВЕННАЯ КОРПОРАЦИЯ ПО АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ «РОСАТОМ»

Проблемы КМ для РБН, объектов ЗЯТЦ и технологий переработки ОЯТ и обращения с РАО»

Адамов Е.О

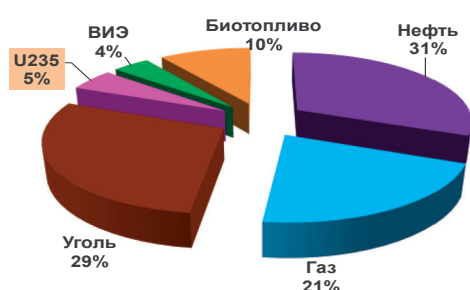
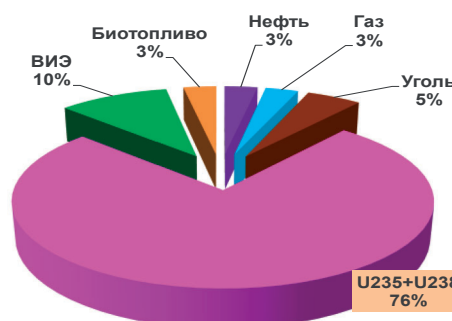
18 марта 2020 г.



Системные проблемы «старой» технологической платформы ЯЭ



1. Безопасность (аварии EBR-I, Windscale, Three-Mile, Чернобыль, Фукусима)
2. Низкая эффективность использования добываемого природного урана - 0,7%



3. Отложенные решения по ОЯТ
4. Потеря конкурентоспособности
5. Риск переключения делящихся материалов, обращающихся в ЯТЦ, на военные или террористические цели

Последствия опоздания с решением проблем ядерной энергетики

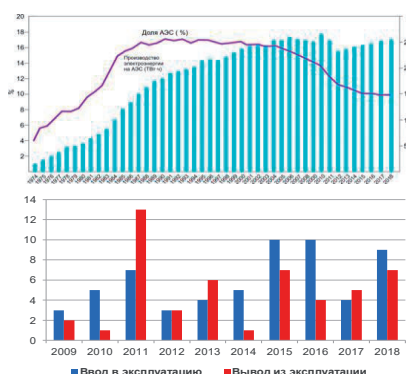


Глобальная ЯЭ находится в **кризисном состоянии**. От 18% в начале 1990-х, на конец 2018 г. она снизилась до 10 %.

Ввод новых блоков АЭС за 10 последних лет примерно равен выводу из эксплуатации и уступает по масштабам вводу мощностей ВИЭ

Основным барьером на пути развития современной ЯЭ, является **конкурентоспособность, которая упирается в проблему безопасности**

Попытки решить проблему безопасности путём создания дополнительных активных средств защиты привели к **снижению конкурентоспособности ЯЭ** в сравнении с органической энергетикой



3

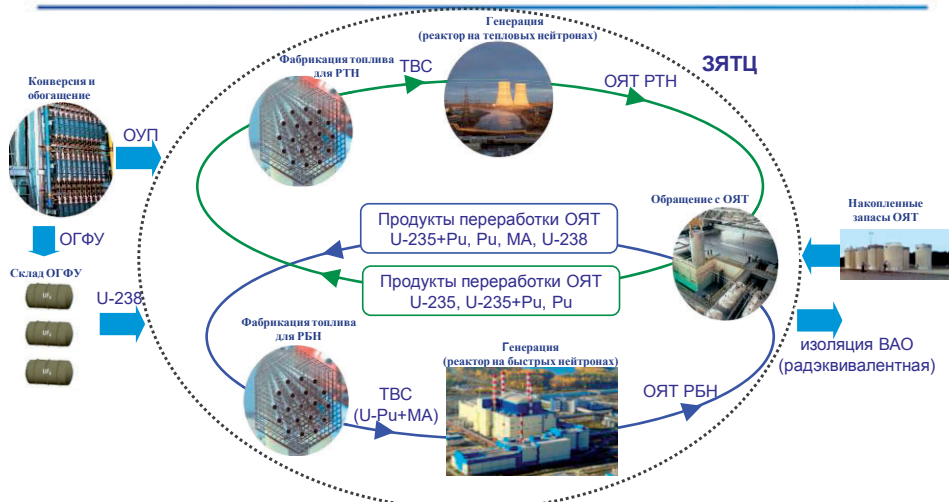
Проектное направление «ПРОРЫВ»



- Исключение тяжелых аварий на АЭС, требующих эвакуации населения
- Полное использование энергетического потенциала уранового сырья (независимость от сырьевой составляющей и волатильности цен на органику)
- Последовательное приближение к радиационно-эквивалентному (по отношению к природному сырью) захоронению РАО
- Технологическое усиление режима нераспространения
- Обеспечение конкурентоспособности ЯЭ, в сравнении с другими видами генерации по стоимости энергии

4

Принципиальная схема двухкомпонентной атомной энергетики (система РБН и РТН)



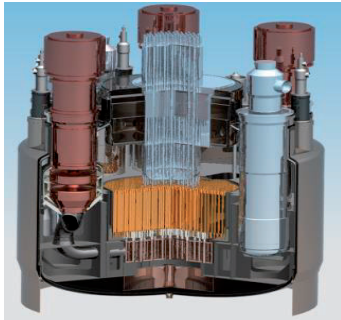
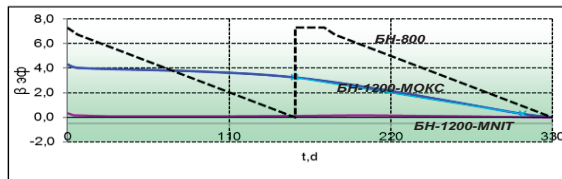
Эффективность ЗЯТЦ возрастает по мере вытеснения из него топлива на основе урана-235 уран-плутониевым топливом

РБН – реактор на быстрых нейтронах
РТН – реактор на тепловых нейтронах

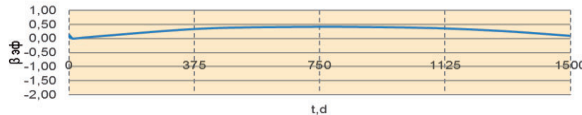
5

Интегральная конструкция РУ — позволяет локализовать течи теплоносителя в объеме корпуса РУ и исключить осушение активной зоны. Это **исключает аварии с потерей охлаждения**, требующие эвакуации населения.

Равновесное плотное топливо — исключение реактивных аварий в РУ БН



Запас реактивности в РУ БРЕСТ с MNIT-топливом



6

Конструкционные материалы для ТВЭ и ТВС РБН



• **Цель:** обеспечить работоспособность оболочек ТВЭ и элементов ТВС в РУ для АЭС с повышенным к.п.д. и ресурсом. Кроме металла в мире рассматривается керамика на базе SiC.

• **Условия работы:**

- среда наружная — Pb, Na, внутренняя — окись и нитрид смеси урана и плутония
- при диапазоне т-р для Pb 400-800°C, 1100°C (ПА 24 ч), 1400 °C (ЗПА 100 ч)
- при диапазоне т-р для Na 400-720°C, 950°C (ПА, ЗПА 100 ч)
- повреждающая доза — не менее 250 сна;
- выгорание топлива — 12% среднее
- коррозионная и эрозионная стойкость;
- стабильность длительных механических характеристик;
- технологичность при изготовлении: обработка резанием, гибка, хорошая свариваемость или аддитивные технологии (для элементов ТВС);
- низкая активация для захоронения.



Стоимость — не выше современных КМ

7

Конструкционные материалы для РБН



Цель: Для оборудования реакторной установки (РУ) с жидкометаллическим теплоносителем должны быть выбраны и обоснованы конструкционные материалы, работающие в контакте с жидким Pb, Na на срок эксплуатации 100 лет. Сегодня с Pb: аустенитные стали типа 10X15H9C3Б1 (30 лет), с Na: аустенитные стали типа 08X16H11M3 (60 лет)

Условия работы:

- среда — Pb, Na;
- температура Pb 400-650°C (НЭ); 950°C (ПА 24 ч), 1300 °C (ЗПА 100 ч)
- температура Na 400-600°C (НЭ); 950°C (ПА, ЗПА 100 ч)
- повреждающая доза — не менее 50 сна;
- коррозионная и эрозионная стойкость;
- стабильность длительных механических характеристик;
- технологичность при изготовлении (обработка резанием, гибка, хорошая свариваемость или аддитивные технологии (размеры более 10 м).

Стоимость — не более, чем современных КМ

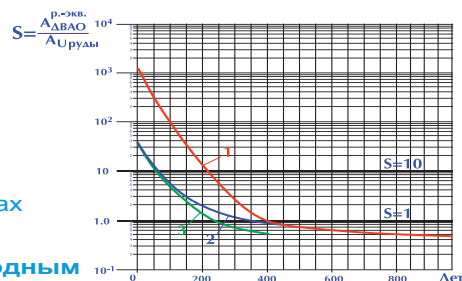
8

ПУТИ РЕАЛИЗАЦИИ ЦЕЛИ

- Запрет на захоронение РАО, содержащих экологически значимые количества ДВАО
- Сокращение количества хранящегося ОЯТ ТР и исключение накопления ОЯТ БР
- Изоляция РАО

СРЕДСТВА РЕАЛИЗАЦИИ ЦЕЛИ

- Переработка ОЯТ ТР и БР
- Трансмутация МА:
 - в энергетических ядерных реакторах
 - в специальных “дожигателях”
- Радиационно-эквивалентное (с исходным урановым сырьём) захоронение РАО



9

Технология СНУП топлива в ПН «Прорыв»



Установка КТС (спекание шашек - печь периодического действия)

Конструкционные материалы: Реторта - вольфрам; Лодочка - вольфрам; Нагреватель - углеродный композит; Теплоизоляция - материал на основе углеродного волокна.

Установка спекания таблеток (непрерывный процесс - проходная печь)

Конструкционные материалы: Лодочка - вольфрам; Нагреватель - вольфрам; Внутренняя футеровка - высокоплотный оксид циркония; Внешняя (наружная) - оксид алюминия.



Использование аддитивных технологий



- Сокращение потерь металла, длительности изготовления оболочек ТВЭ, шестигранных труб (до 190 мм под ключ и длиной до 4 м), головок ТВС (до 190 под ключ и до 1,5 м), дистанционирующих решёток (сотовые конструкции с толщиной стенки 0,3 мм, шероховатостью Ra < 0,5 мкм).
- Использование многослойного материала оболочки твэла (применение градиента свойств дифференцированных по сечению изделия КМ):
 - одновременно должна быть прочной, обладать высоким пределом текучести, коррозионной устойчивостью как к используемому ядерному материалу, так и теплоносителю.
 - при переработке топлива должна быть легко снимаема при расчехлении твэла.
- Покрытие термо- и износостойких элементов: лодочки, пресс-инструмент установок прессования шашек и таблеток, шнеки передачи абразивных продуктов
- Изготовление элементов робототехнических изделий для радиационно-опасных производств.



11

«Проблемы КМ технологий переработки ОЯТ и обращения с РАО (1)»



- Для выпарных процессов требуются материалы с высокой теплопроводностью (на уровне стали), прочностью* (сталь) и устойчивые к воздействию фтор-иона в азотнокислых растворах при температурах 100-110 °С.
 - Для вращающихся печей окисления и/или восстановления (1250-1500 °С), требуются материалы, устойчивые как в окислительной (O_2 , O_3 , N_2O_4), так и в восстановительной среде (H_2 , NH_3);
 - Непористые материалы, устойчивые в расплавах $LiCl$, $LiCl-Li_2O$, $LiCl-KCl$, LiF при температурах 600-800 °С*:
 - прочные материалы с химической устойчивостью не хуже молибдена;
 - тигли больших диаметров (600 – 1000 мм) из таких материалов;
 - трубки, изделия сложной формы, например насосы;
 - технология соединения трубок между собой и трубок с тиглем.
 - Материалы, устойчивые к воздействию расплавов стекол (боросиликатного, алюмофосфатного и др.) при температурах 1300-1500 °С* (требования см. выше);
- * - прочность и другие мех. свойства на уровне сталей;
 ** - возможно покрытия, но не отслаивающиеся при механических или термических воздействиях, наносимые на поверхность обечаек и трубок теплообменников либо после сборки, либо не нарушающиеся при сварке

12

«Проблемы КМ технологий переработки ОЯТ и обращения с РАО (2)»



Химически стойкие токопроводящие покрытия (например, материалы для анодов электрохимических процессов растворения в азотнокислых средах)

-температуры 20-60 °С; растворы кислот или щелочей; плотность тока до 5 Ам/см²

Химически стойкие токопроводящие материалы для электродов пирохимических процессов, устойчивые в расплавах $LiCl$, $LiCl-Li_2O$, $LiCl-KCl$, LiF при температурах 600-800 °С



Макет электролизёра «металлизации» на 100 А в АО «ГНЦ НИИАР»



Катодный узел лаб. электролизёра с изоляторами из керамики MgO

Композитные цементные (керамические) матрицы с нано-упрочняющими и нано-поглощающими (абсорбция) добавками

Смазки для работ в условиях радиационных полей и в инертной среде

Радиационно и химически стойкая (до 10^8 Гр) изоляция для обмоток электродвигателей и передачи сигнала

Примеры того, как эти проблемы решаются сегодня, приведены в Приложении

13

ОДЭК – опытно-демонстрационный энергетический комплекс (АО «СХК», г. Северск Томской обл.)



МФР
 • Мощность:
 14, 75 т./год по СНУП-топливу

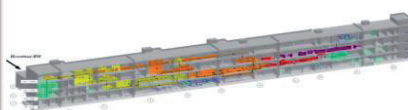
• Сроки строительства:
 2014-2022 гг.

БРЕСТ
 • Мощность:
 300 МВт (эл.)

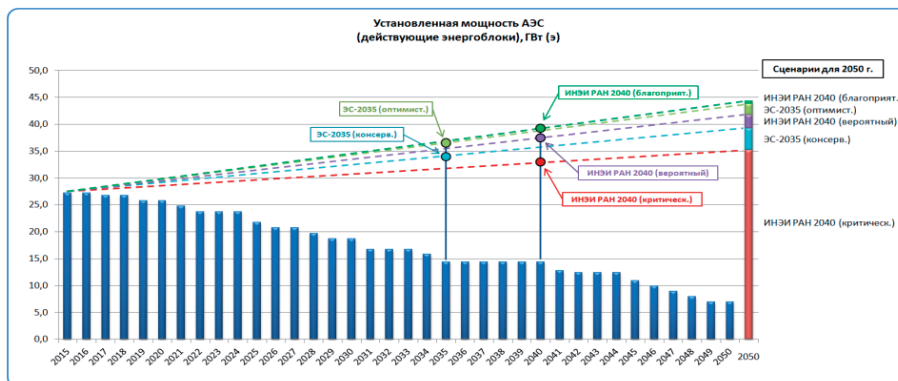
• Сроки строительства:
 2020-2026 гг.

МП
 • Мощность:
 10 т. ОЯТ/год

• Сроки строительства:
 2024-2028 гг.

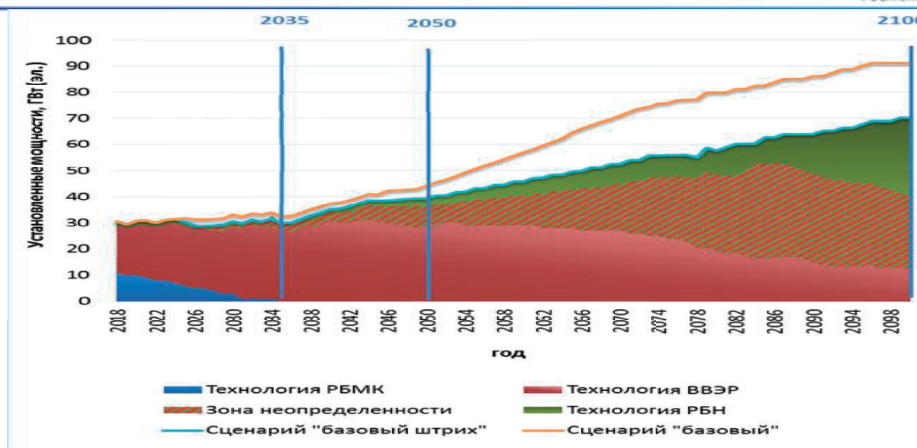


14



15

Стратегия развития ЯЭ России



16

Проект «ПРОРЫВ» - атомный проект 2



Томский академический и университетский кулст, МГУ, НГУ, МИФИ, РХТИ

17

Презентация доклада д.х.н., профессора РАН, г.н.с. ИК СО РАН Николая Юрьевича Адонина, «Разработка прямой безрастворной твердофазной опытно-промышленной технологии переработки реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена со специальной морфологией и наноструктурой в высокопрочные и высокомодульные пленочные нити различной номенклатуры» для его реализации в Фонде перспективных исследований

«Разработка прямой безрастворной твердофазной технологии переработки реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена в пленочные нити»

шифр проекта «Полимер»

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН
ЗАО ГК «Техполимер»
ООО «НПП «Инжмет»

**Потребность в материалах, пригодных для эксплуатации в условиях
Крайнего Севера и Арктики**



Сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ)

СВМПЭ – полиэтилен с молекулярной массой более 10^6

Основные свойства СВМПЭ:

- высокая ударпрочность (до 170 КДж/м²)
- стойкость к абразивному воздействию
- морозостойкость (до -100°С)
- низкий коэффициент трения
- высокая устойчивость к агрессивным средам
- высокая прочность (300-350 сН/текс) нитей и волокон
- биосовместимость

Области применения СВМПЭ:

- защита летательных объектов (спутников) от космического мусора
- высокопрочные нити для изготовления средств бронезащиты, канатов и др.
- сепараторы для автомобильных аккумуляторов
- эндопротезы
- фильтры для работы в агрессивных средах в пищевой и химической промышленности
- модифицирование резины
- машиностроение, строительство
- Арктические применения

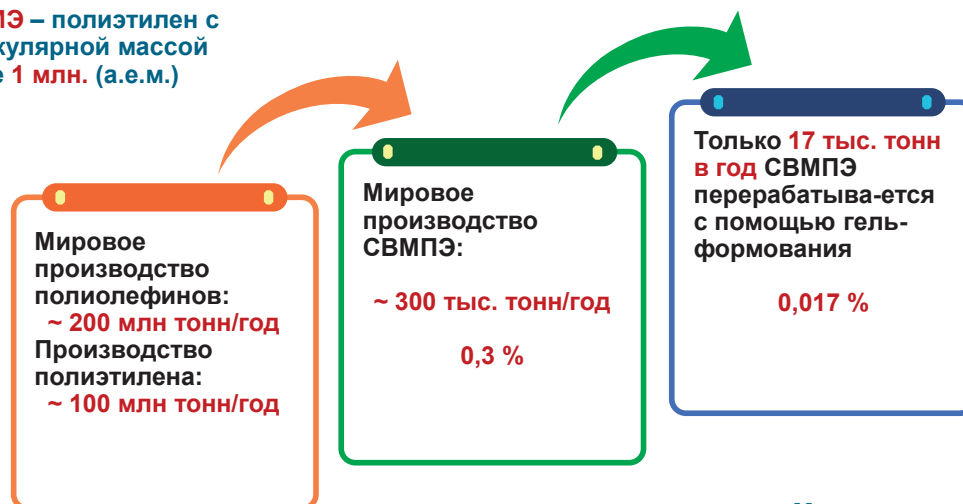
СВМПЭ – как компонент (наполнитель, матрица) полимерных композиционных материалов (ПКМ):

- Дисперсный наполнитель в эластомерах (Применение СВМПЭ в составе резины позволяет повысить стойкость к истиранию в 2-4 раза и понизить температуру хрупкости на 6-8 градусов)
- Армирование ПКМ волокнами из СВЭМП, включая ткани

3

Доля СВМПЭ в мировом производстве полиэтилена

СВМПЭ – полиэтилен с молекулярной массой более **1 млн.** (а.е.м.)



Молекулярная масса обычного ПЭ не превышает **500 тыс.** (а.е.м.)

4

Высокопрочные (ВП) и высокомодульные (ВМ) нити

- Только высокопрочные (ВП) и высокомодульные (ВМ) нити и волокна, обладающие наиболее высокими механическими характеристиками, чаще всего применяются для высокопрочных композитов в СИБ, ЛА, БЛА, ВВСТ.
- Нити из СВМПЭ имеют наиболее высокие значения удельных упруго-прочностных характеристик, не поглощают воду, обладают биосовместимостью (или биоинертностью) и не теряют свойства в процессе хранения или эксплуатации.

Наименование	Прочность, сН/текс	Модуль упругости, сН/текс	Плотность, г/см ³
Нити из СВМПЭ			
Дyneema SK65-SK99	265-416	8500-15800	0.97
Spectra 900-1000	260-320	9000-12000	0.97
Пара-арамидные волокна			
Кевлар 49-KM2	210-240	8400-5800	1.43-1.3
Армос (Русар, Руслан)	310-450	9700-11700	1.45-1.46
Углеродные волокна			
T300-T800	205-315	13350-16500	1.76-1.82
Стекланные волокна			
Е стекло - S стекло	120-165	3450-3700	2.47-2.56



Традиционная гель-технология получения ВП и ВМ волокон и нитей

НЕДОСТАТКИ ТРАДИЦИОННОЙ ГЕЛЬ-ТЕХНОЛОГИИ



Технологичность

•растворение РП СВМПЭ проводят в высококипящем растворителе (декалин, вазелиновое масло и др.) при температуре не менее 150°C и интенсивном перемешивании высоковязкого прядильного раствора, что приводит к частичной механохимической деструкции полимера;

•из-за низкой концентрации СВМПЭ в растворе (не более 4-5%), в цикл переработки вовлекается не менее 95-96% растворителя (балласта) резко удорожающего стоимость получаемого волокна;

•наличие остаточного количества растворителя после стадии его экстракции и сушки «мокрого» гель-волокна приводит к значительному снижению механических характеристик волокон при их хранении.

Экономичность

•регенерация использованного высококипящего растворителя является многостадийной и крайне энергозатратной процедурой.

Экологичность

•регенерация высококипящего растворителя типа декалина является экологически опасной процедурой.

6

Преимущество разрабатываемой технологии перед имеющимися



Себестоимость производства нитей СВМПЭ по безрастворной технологии будет примерно на порядок ниже, чем аналогичных нитей из СВМПЭ по гель-технологии

7

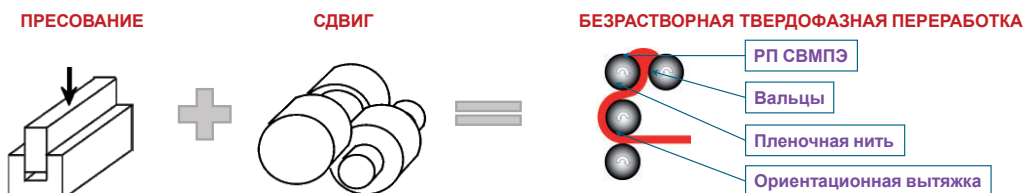
Принцип безрастворной переработки РП СВМПЭ

Замена или исключение стадии:

•формования волокна из 2-5% раствора РП СВМПЭ на безрастворное твердофазное формование.

Автоматически исключает стадию:

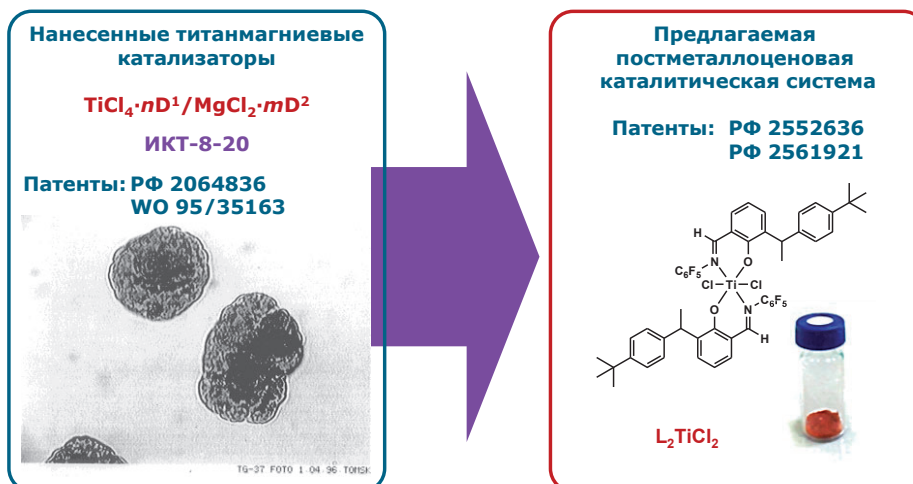
•приготовления 2-5% раствора РП СВМПЭ (растворение РП СВМПЭ);
 •экстракции растворителя и сушку волокна при повышенной температуре;
 •регенерации растворителя и экстракцию экстрагента.



Технология безрастворной твердофазной переработки РП СВМПЭ заключается в применении хорошо известных в металлургии технологических процессов основанных на пластической деформации материала при прокатке на вальцах, (каландрировании), прессовании со сдвигом и т.д.

8

Переход к новым катализаторам полимеризации этилена



9

Сравнение процессов полимеризации

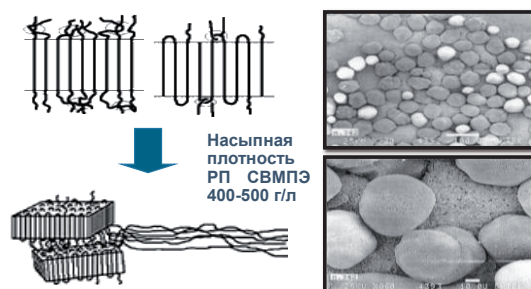


10

Предпосылки создания безрастворной технологии переработки СВМПЭ

Традиционная нанесенная каталитическая система

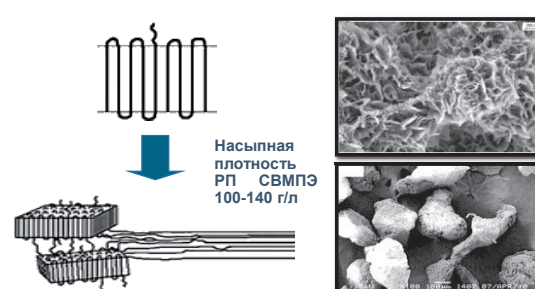
Межмолекулярные зацепления в аморфных областях не позволяют при вытяжке достигнуть предельных значений механических характеристик



Переработка реакторного порошка СВМПЭ в волокна возможна только по гель-технологии

Предлагаемая постметаллоценовая каталитическая система

Морфология типа «стопка ламелл» позволяет при вытяжке достигнуть предельные значения механических характеристик



Особая морфология частиц РП СВМПЭ открывает возможность переработки в волокна и пленки по безрастворной твердофазной технологии

11

Результат реализации аванпроектов ФПИ «Полимер А1» и «Полимер А2»

Выполнено экспериментальное подтверждение и технико-экономическое обоснование возможности разработки безрастворной твердофазной технологии переработки реакторного порошка сверхвысокомолекулярного полиэтилена (РП СВМПЭ) со специальной морфологией и наноструктурой в ВП и ВМ пленочные нити.

Аванпроект «ПОЛИМЕР А1»

- Разработаны подходы к получению укрупненных лабораторных образцов катализатора полимеризации этилена и реакторных порошков СВМПЭ;
- Получены прототипы катализатора полимеризации этилена;
- Получены прототипы РП СВМПЭ пригодного к безрастворной твердофазной переработке в пленочную нить;
- Сформулирован технический облик и исходные данные для создания опытно-промышленного оборудования по получению катализатора и РП СВМПЭ.

Аванпроект «ПОЛИМЕР А2»

- Обоснован подход к масштабированию до опытного уровня безрастворной технологии переработки РП СВМПЭ в ВП и ВМ пленочные нити;
- Нарботаны демонстрационные партии ВП и ВМ пленочных нитей из РП СВМПЭ;
- Продемонстрирована возможность реализации разрабатываемой безрастворной технологии в условиях реального промышленного производства;
- Продемонстрирована возможности использования РП СВМПЭ со специальной морфологией и наноструктурой в традиционном технологическом процессе гель-формования с получением «мокрой» гель-нити.

12

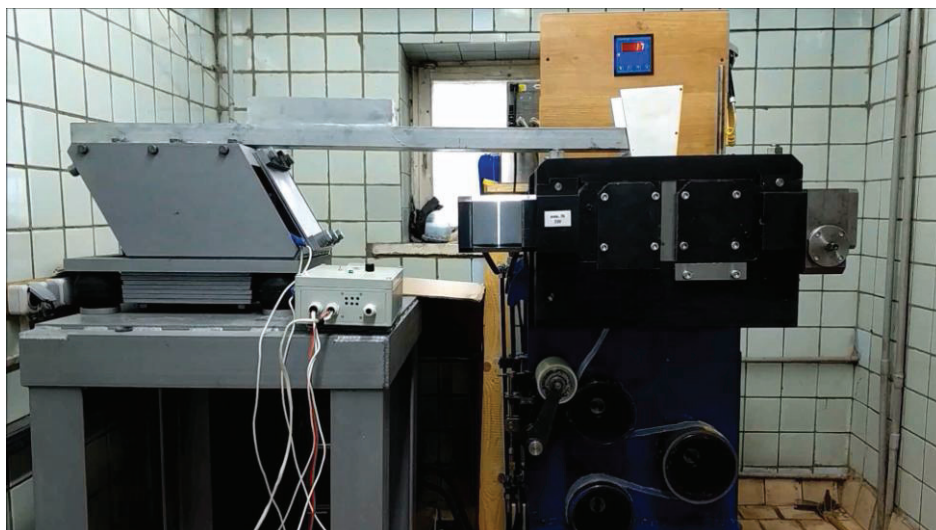
Результат реализации аванпроектов ФПИ «Полимер А1» и «Полимер А2»



Образцы РП СВМПЭ со специальной морфологией и наноструктурой для изготовления ВП и ВМ пленочных нитей безрастворным твердофазным способом, наработанные в ходе реализации аванпроекта «Полимер А1»

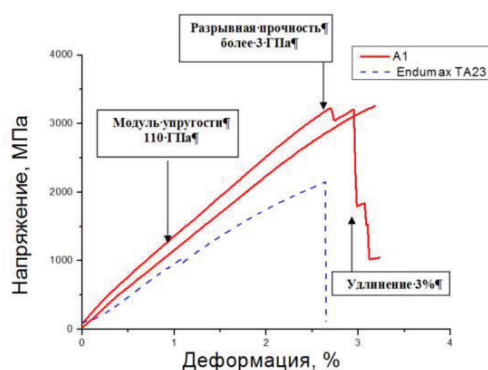
13

Результат реализации аванпроектов ФПИ «Полимер А1» и «Полимер А2»



14

Результат реализации аванпроектов ФПИ «Полимер А1» и «Полимер А2»



Кривые напряжение-деформация для ВП и ВМ пленочных нитей из РП СВМПЭ со специальной морфологией и наноструктурой, синтезированных в рамках выполнения аванпроекта «Полимер А1» и сформованные в оптимизированных условиях в рамках выполнения проекта «Полимер А2».

Кривая (синий цвет) для промышленного образца Endumax TA23 компании Teijin Aramid приведена для сравнения.

15

Цель проекта «Полимер»:

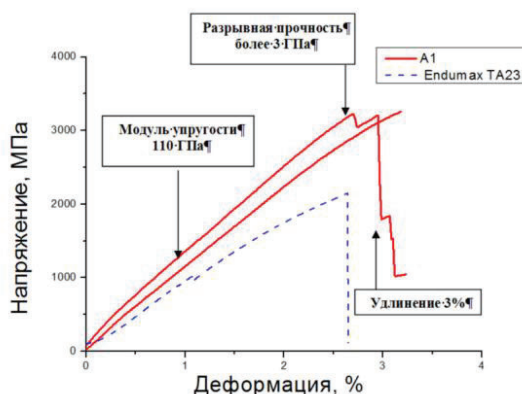
Разработка прямой безрастворной твердофазной технологии переработки реакторных порошков сверхвысокомолекулярного полиэтилена (далее – РП СВМПЭ) со специальной морфологией и наноструктурой в высокопрочные и высокомодульные пленочные нити широкой номенклатуры.

Задачи проекта «Полимер»:

1. Разработка опытных технологий получения: (1) катализатора полимеризации этилена; (2) РП СВМПЭ; (3) монолитных и ориентированных пленочных нитей из СВМПЭ широкой номенклатуры.
2. Разработка и создание: а) линейки реакторов для получения катализаторов полимеризации этилена; б) линейки реакторов для получения РП СВМПЭ объемом до 1,0 мЗ; в) линейки опытных устройств для получения монолитной пленочной нити из СВМПЭ; г) опытной линии для ориентационной вытяжки монолитной пленочной нити из СВМПЭ.
3. Нарботка опытных партий пленочных нитей из РП СВМПЭ различной номенклатуры и изготовление демонстрационных образцов.
4. Проведение испытаний демонстрационных образцов.
5. Проведение маркетингового анализа и обоснование продуктовой линейки.

16

Результат реализации аванпроектов ФПИ «Полимер А1» и «Полимер А2»



Кривые напряжение-деформация для ВП и ВМ пленочных нитей из РП СВМПЭ со специальной морфологией и наноструктурой, синтезированных в рамках выполнения аванпроекта «Полимер А1» и сформованные в оптимизированных условиях в рамках выполнения проекта «Полимер А2».

Кривая (синий цвет) для промышленного образца Endumax TA23 компании Teijin Aramid приведена для сравнения.

17

Планируемая кооперация исполнителей проекта

Статус исполнителя проекта	Наименование исполнителя	Месторасположение	Наименование выполняемой работы
Головной исполнитель	ФГБУН Федеральный исследовательский центр Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН	г. Новосибирск	Разработка технологий получения катализатора полимеризации этилена и РП СВМПЭ. Разработка опытно-промышленной линейки реакторов для получения катализатора полимеризации этилена и РП СВМПЭ
	Волгоградский филиал Института катализа СО РАН	г. Волгоград	Масштабирование технологий получения катализатора полимеризации этилена и РП СВМПЭ до опытно-промышленного уровня. Изготовление и пуско-наладка опытно-промышленной линейки реакторов для получения катализатора полимеризации этилена и РП СВМПЭ
Соисполнитель 1	ФГБУН Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН	г. Москва	Разработка технологии получения ВП и ВМ пленочных нитей из РП СВМПЭ широкой номенклатуры
Соисполнитель 2	ООО «НПП «Инжмет»	г. Москва	Разработка и изготовление опытных установок монолитизации РП СВМПЭ
Соисполнитель 3	ЗАО ГК «ТехПолимер»	г. Дивногорск	Масштабирование технологии получения пленочных нитей широкой номенклатуры до опытного уровня Пуско-наладка опытной линии получения ВП и ВМ пленочных нитей широкой номенклатуры
		г. Рязань	Разработка технологии получения демонстрационных образцов

Ожидаемые результаты реализации проекта шифр «Полимер»

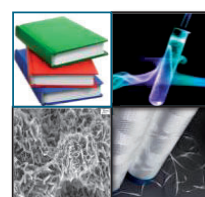
Разработка и создание аппаратного оформления технологий получения катализатора, РП СВМПЭ, а также пленочных нитей различной номенклатуры

Ожидаемый результат:
комплект конструкторской и эксплуатационной документации на оборудование;
линейка реакторов для получения катализатора полимеризации этилена;
линейка реакторов для получения РП СВМПЭ объемом до 1,0 м³;
линейка устройств монолитизации РП СВМПЭ;
опытная линия по получению ВП и ВМ пленочной нити различной номенклатуры из РП СВМПЭ.



Разработка и масштабирование технологий получения катализатора, РП СВМПЭ, а также пленочных нитей различной номенклатуры

Ожидаемый результат:
комплект технологической документации по получению катализатора полимеризации этилена, РП СВМПЭ, пленочной нити различной номенклатуры;
опытные партии катализатора полимеризации этилена, РП СВМПЭ, пленочной нити различной номенклатуры.



Разработка и создание демонстрационных образцов

Ожидаемый результат:
комплект конструкторской документации;
демонстрационные образцы (геотекстиль, сети, канаты, футеровка, элементы баллистической бронезащиты и др.).



ОЖИДАЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОЕКТА «ПОЛИМЕР»

ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ ДОКУМЕНТАЦИЯ

- не менее трех патентов (синтез катализатора и РП СВМПЭ, переработка РП СВМПЭ);
- технология синтеза каталитической системы (катализатор и сокатализатор);
- технология синтеза РП СВМПЭ со специальной морфологией;
- технология безрастворной твердофазной переработки РП СВМПЭ в пленочную нить;
- технология получения ВП и ВМ пленочных нитей;
- технология модификации поверхности ВП и ВМ пленочных нитей на основе СВМПЭ;
- технология синтеза и нанесения связующего на ВП и ВМ пленочные нити;
- технология получения однонаправленных КМ (UD-материалов) баллистического и конструкционного назначения из ВП и ВМ пленочных нитей на основе СВМПЭ.

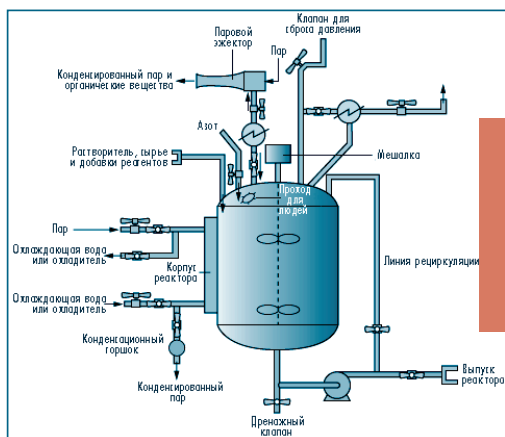
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ ЛИНИЯ

- конструкторская документация;
- установка (пилотная) для синтеза РП СВМПЭ
- установка монолитизации РП СВМПЭ;
- установка ориентационной вытяжки и получения ВП и ВМ пленочных нитей на основе СВМПЭ.

ОБРАЗЦЫ ДЕМОСТРАТОРЫ

- катализатор;
- РП СВМПЭ;
- ВП и ВМ пленочная нить на основе СВМПЭ;
- канат из ВП пленочной нити на основе СВМПЭ;
- КМ баллистического и конструкционного назначения.

Облик опытно-промышленной технологической линии получения РП СВМПЭ



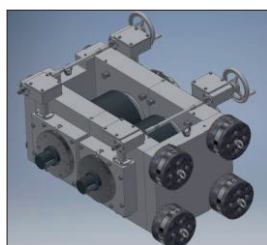
Принципиальная схема опытно-промышленного реактора полимеризации этилена для получения РП СВМПЭ пригодного к переработке безрастворным твердофазным способом



Образец реактора полимеризации этилена емкостью 1000 литров, имеющегося в распоряжении ВФ ИК СО РАН

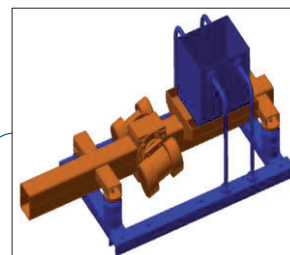
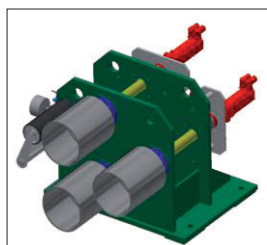
21

Облик опытных установок по получению монолитных пленочных нитей из РП СВМПЭ

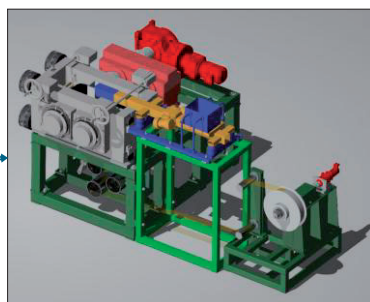


3D визуализация узла формирования монолитных пленочных нитей из РП СВМПЭ

3D визуализация вибрационного питателя

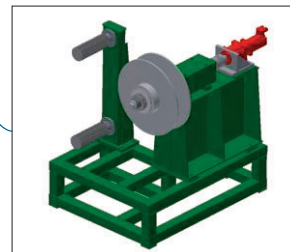


3D визуализация устройства натяжения ленты



3D визуализация опытно-промышленной технологической линии по получению монолитных пленочных нитей из РП СВМПЭ

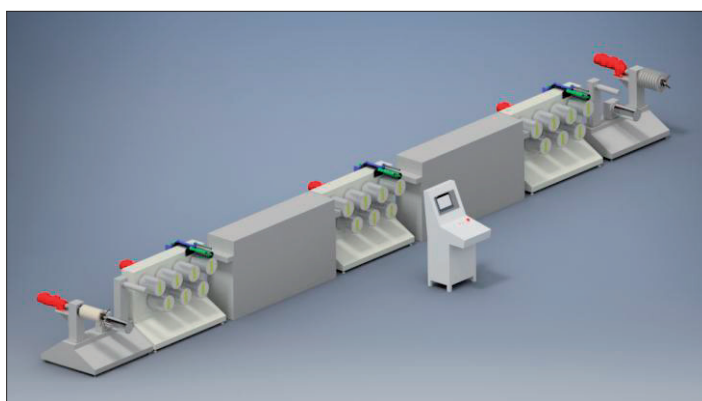
3D визуализация намотчика ленты



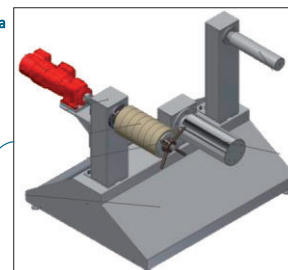
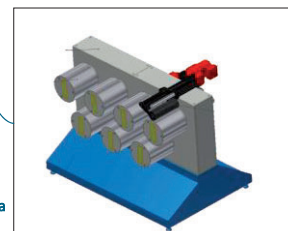
22

Облик опытной линии получения ВП и ВМ пленочных нитей широкой номенклатуры из РП СВМПЭ

3D визуализация шпулярника



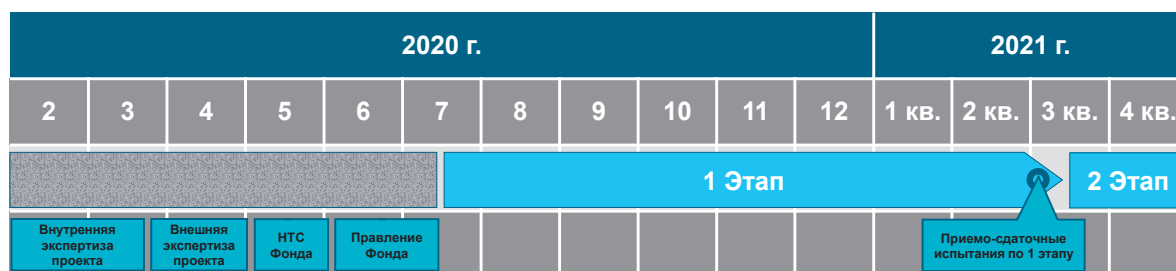
3D визуализация опытно-промышленной линии получения пленочных нитей широкой номенклатуры на основе СВМПЭ



3D визуализация тянущего устройства

23

График подготовки к запуску проекта шифр «Полимер»



Текущий статус подготовки к запуску проекта шифр «Полимер»

- подготовлен рабочий комплект материалов заявки на реализацию проекта;
- проводится корректировка материалов заявки (с учетом замечаний экспертов) на реализацию проекта;
- осуществляется доработка проекта технического задания с учетом требований потенциальных потребителей.

Ожидаемые результаты реализации 1-ого этапа проекта «Полимер»

- комплект конструкторской и эксплуатационной документации на оборудование;
- линейка реакторов для получения катализатора полимеризации этилена;
- линейка реакторов для получения РП СВМПЭ объемом до 1,0 м3;
- линия по получению пленочную нить различной номенклатуры.

24

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ПОТРЕБИТЕЛИ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОЕКТА «ПОЛИМЕР»

Результаты проекта	Потенциальные потребители									
										
Каталитическая система (катализатор и сокатализатор)										
РП СВМПЭ										
ВП и ВМ Пленочные нити на основе СВМПЭ										
Композиционные материалы баллистического назначения										
Композиционные материалы конструкционного назначения										
Сети, канаты, шнуры										
Технологии (РИД)										
Экспериментальная технологическая линия (ЭТЛ)										
Конструкторская документация на ЭТЛ										

25

Презентация доклада академика Бориса Николаевича Четверушкина,
д.ф.-м.н. Сергея Владимировича Полякова,
чл.-корр. РАН Михаила Владимировича Якобовского (Институт прикладной
математики имени М.В. Келдыша РАН) «Суперкомпьютерные технологии для
решения задач материаловедения: проблемы и возможности»

Суперкомпьютерные технологии для решения задач материаловедения: проблемы и возможности

Б.Н. Четверушкин, С.В. Поляков, М.В. Якобовский

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

**30 сентября 2020 г.
г. Москва, Президиум РАН**

Введение

Фундаментальные и прикладные **проблемы материаловедения** были и остаются одним из **главных направлений** развития науки, техники и технологий во всем мире. В последнее время это связано с широким внедрением нанотехнологий в промышленности. Также появились новые **вызовы стратегического характера**, определяющие развитие высокотехнологичных отраслей хозяйства и социальной сферы на многие десятилетия вперед.

Сегодня недостаточно иметь законченные решения по широкому спектру задач материаловедения. Необходимо постоянное развитие этой отрасли знания, которая все более обращается к **методам математического и компьютерного моделирования**. Последнее невозможно без использования современных **суперкомпьютерных технологий моделирования (СКТМ)**.

Использование СКТМ стало необходимым требованием практически всех масштабных исследований свойств новых материалов. На него опираются многие методы решения инженерных задач, связанные с разработкой и изготовлением новых материалов и конструкций, анализом их прочности и износостойкости, технологиями лазерной и термической обработки изделий и их покрытий, сопровождением жизненного цикла изделий и их безопасной утилизации.

Классы задач, требующие интенсификации исследований

1. Определение **свойств** чистых веществ и перспективных материалов в широком диапазоне параметров.
2. **Конструирование** новых материалов, в том числе наноструктурированных материалов с заданными свойствами.
3. Совершенствование **технологий изготовления** новых материалов.
4. Новые способы механической, термической, химической и лазерной **обработки материалов**.
5. Неразрушающий **контроль** свойств и качества изготовления новых материалов на всех стадиях производства.
6. Разработка микро- и наноразмерных механических, электронных, химических, биологических **устройств, конструкций** и систем на их основе.
7. Анализ процессов **разрушения** материалов и конструкций.
8. Исследования в области оптимизации параметров **жизненного цикла** материалов.
9. Экологически безопасная и экономически эффективная **утилизация** материалов.
10. **Комплексный подход**, объединяющий задачи 1-9.

3

Что могут дать СКТМ в области материаловедения?

1. Новое высокое качество получаемых фундаментальных знаний и технических решений на основе использования комплекса математических моделей, параллельной обработки данных, использования технологий искусственного интеллекта.
2. Существенное сокращение времени исследований (от фундаментальной идеи до практической реализации) за счет использования ресурсов научных центров коллективного пользования (НЦКП) и промышленных центров обработки данных (ПЦОД).
3. Быстрое внедрение получаемых знаний в конкретные технические и технологические решения за счет проникновения методов СКТМ в производственный цикл изделий.
4. Подготовку новых квалифицированных кадров по многим связанным вопросам за счет использования в вузах программ обучения СКТМ и выполнения учащимися совместных проектов с организациями науки и промышленности.

4

Что необходимо для широкого внедрения СКТМ в области материаловедения?

1. Создание консорциума по решению задач материаловедения, объединяющего академическую, вузовскую и отраслевую науку, промышленность и бизнес-компании.
2. Оснащение организаций консорциума современной высокопроизводительной техникой
3. Разработка ФЦП развития исследований в области материаловедения с использованием СКТМ на период до 2030 г.
4. Проведение масштабных поисковых исследований в рамках ФЦП участниками консорциума и другими организациями.
5. Создание национальной сети баз данных и знаний по материалам и их цифровым двойникам на основе существующих и вновь созданных НЦКП и ПЦОД.
6. Подготовка кадров в профильных вузах.

5

Имеющийся научный задел

В системе РАН и Минобрнауки РФ имеется множество организаций, так или иначе связанных с решением проблем материаловедения. Ими накоплен большой опыт в области материаловедения и смежных отраслях знания.

В данном докладе упоминаются в основном работы, связанные с применением технологий компьютерного и суперкомпьютерного моделирования и выявляющие его проблемы.

В этом контексте хотелось бы отметить фундаментальные работы Институты из Отделения химии и наук о материалах РАН, Отделений физических и математических наук РАН, а также работы ОИВТ РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Физического института имени П.Н. Лебедева, Института вычислительных технологий СО РАН, ИПЛИТ РАН, Химического факультета, Института механики и НИВЦ МГУ имени М.В. Ломоносова, Московского энергетического института, и др.

6

Атомистическое моделирование: успехи и проблемы

Большой класс задач, связанный с определением свойств чистых веществ и их комбинаций и композитов может быть решен методами атомистического моделирования с опорой на СКТМ.

Определенные успехи в этом направлении получены для множества твердых веществ (прежде всего металлов и полупроводников), жидких сред, природных и технических газов.

На основе результатов многолетних расчетов создана БД ЭПИДИФ. За рубежом наиболее известный ее аналог – NIST (США).

Однако прорыв в сторону анализа свойств новых веществ и создания больших и сверхбольших молекулярных структур и сложных веществ только предстоит.

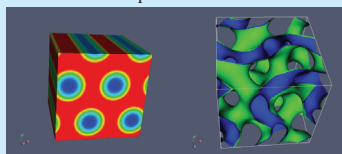
Небольшая производительность отечественных суперкомпьютерных систем ограничивает возможности атомистического моделирования на уровне порядка 10 млрд. объектов, в то время как за рубежом достигнуты рекордные 10 квад. объектов (+6 десятичных порядков). Данное отставание можно преодолеть только с помощью комплексных подходов, направленных на совершенствование СКТМ и возрождения отечественных суперкомпьютерных систем.

7

Моделирование новых материалов на основе полимеров

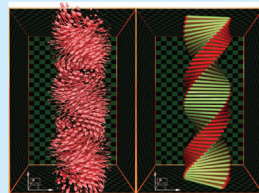
- В современном материаловедении важную роль играют материалы на основе сополимеров, из-за их способности к самоорганизации в упорядоченные пространственные наноструктуры. Эта способность лежит в основе получения новых синтетических материалов с заданными свойствами.

Примеры периодических наноструктур в системах сополимеров



Гексагональная фаза

Фаза гироида

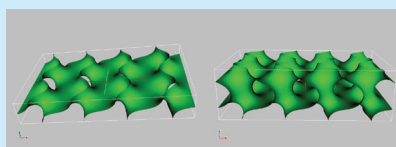


Оrientационное упорядочение в расплаве диблок-сополимеров с гибким и жестким блоками (гексагональная фаза)

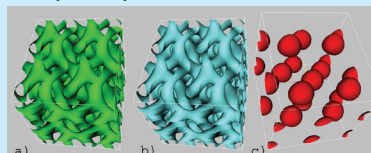
8

Тонкие пленки сополимеров и полимерные нанокомпозиты - основа новых перспективных материалов

- Среди множества перспективных в материаловедении систем сополимеров можно выделить тонкие пленки сополимеров (ТПС) и полимерные нанокомпозиты (ПНК), обладающие уникальными свойствами, которыми можно управлять, изменяя параметры системы (температура, состав, внешние поля и т.п.).



Компьютерная модель проницаемой мембраны на основе стабильной алмазоподобной морфологии, формирующейся в тонких пленках симметричных диблок-сополимеров с ламеллярным паттерном на подложке



Компьютерная модель 3-х компонентного ПНК: упорядочение компонентов диблок-сополимера (а, б) в гироидную фазу и наночастиц (с) в мицеллы

9

Многомасштабное суперкомпьютерное моделирование – основная методология проектирования новых материалов

- Существенной чертой многомасштабного моделирования является определение свойств системы на одном пространственно-временном масштабе с использованием информации о ее поведении на других пространственно-временных масштабах.
- Многомасштабный подход сочетает взаимодополняющие квантово-механические, атомистические, мезоскопические и континуальные модели и методы. В нем используется иерархия вычислительных подходов, относящихся к соответствующим пространственно-временным масштабам.
- В рамках СК-моделирования возможна агрегация полимерных нанокомпозитов и тонких пленок сополимеров соответственно на микроскопических (1 - 10 нм) и мезоскопических (10 - 1000 нм) масштабах.

10

Проблемы многомасштабного моделирования нанокompозитов и тонких пленок сополимеров

- В имеющихся подходах многомасштабного моделирования нанокompозитов и тонких пленок сополимеров отсутствуют следующие важные элементы:
- (I) инструменты анализа топологии полимерной сетки (в случае нанокompозита со сшитой полимерной матрицей);
- (II) приемлемая адаптивная модель, которая обеспечивает механизм сопряжения между атомистическим моделированием и моделированием на мезоскопическом масштабе;
- (III) развитые теоретико-полевые методы прогнозирования глобальной структуры нанокompозитов и тонких пленок на основе сополимеров.

11

Многомасштабное моделирование: требования к вычислительным ресурсам

- Атомистическое моделирование представляется нереальным в случае, когда для полимеров и нанокompозитов необходимо достижение состояния термодинамического равновесия при наличии громадной разницы характерных масштабов времен релаксации компонентов. Поэтому моделирование таких систем на мезоскопическом масштабе должно проводиться с привлечением взаимодополняющих методов, таких как теория слабой сегрегации, численные методы теории среднего самосогласованного поля и самосогласованной теории упругости, метода диссипативной динамики частиц и гибридный подход, сочетающий преимущества полевых и динамических методов.
- Трудности и вызовы, с которыми сопряжены моделирование и проектирование новых материалов на основе полимеров, предполагают наличие мощных вычислительных ресурсов с возможностью проведения параллельных вычислений, позволяющих осуществить расчеты за приемлемое время.

12

Нанобиоэлектроника

Нанобиоэлектроника – новая дисциплина, интегрирующая достижения нанoeлектроники и молекулярной биологии. Ее успех во многом обусловлен развитием нанотехнологий.

В основе нанобиоэлектроники лежит использование процессов переноса заряда в биомакромолекулах и созданных на их основе молекулярных структур нанометрового масштаба. Объединение нанoeлектронных устройств со сложными биологическими структурами, такими, как клетка, перебрасывает мостик между нанобиоэлектроникой и биотехнологией.

Такие биоматериалы, как ДНК, РНК, белки, биомембраны и другие имеют размеры, сравнимые с размерами наночастиц, нанотрубок, квантовых точек. Объединение биоматериалов с металлическими или полупроводниковыми частицами, фуллеренами или углеродными нанотрубками порождает новый класс материалов для создания уникальных электронных или оптических систем.

Основные направления нанобиоэлектроники включают создание на основе таких гибридных систем биосенсоров, сложных нанoeлектронных схем на основе ДНК, конструирование нанобиотранзисторов, диодов, биочипов, наномоторов, нанотранспортеров и т.д.

Создание таких устройств невозможно без построения их квантово-классических моделей и проведения суперкомпьютерных расчетов с использованием грид технологий.

Теоретические работы по нанобиоэлектронике в ИМПБ РАН ведутся более 10 лет.

За это время теоретически рассмотрена возможность создания нанoeлектронного устройства на основе ДНК с тактовой частотой, лежащей в терагерцовом диапазоне, электронных нанобиочипов, логических электронных вентилях на основе ДНК, электронной памяти на основе биомакромолекул и др.

13

Нанобиоэлектроника

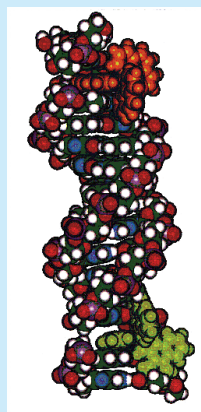
Потенциальные приложения ДНК

DNA nanowires
DNA nanobiochips
DNA nanomotors
DNA posistors
DNA tunneling diods
DNA transistors
DNA biosensors
DNA quantum computers

V.D. Lakhno, DNA Nanobioelectronics, Int. J. Quant. Chem., 2008

14

Charge transfer in oligonucleotides

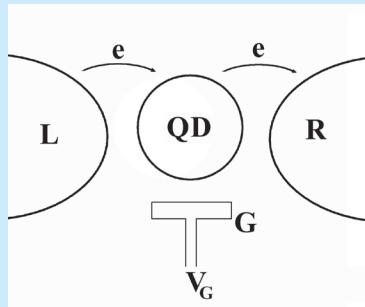


Ruthenium – rhodium molecular complexes are used as donors and acceptors in experiments on electron transfer in DNA.

The donor and the acceptor are linked by a covalent bond to a DNA fragment containing 15 nucleotide pairs.

15

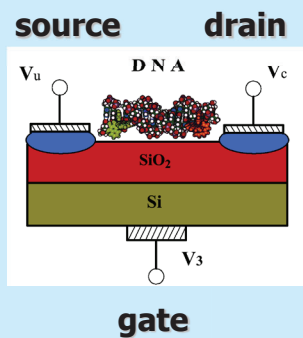
Nanotransistor



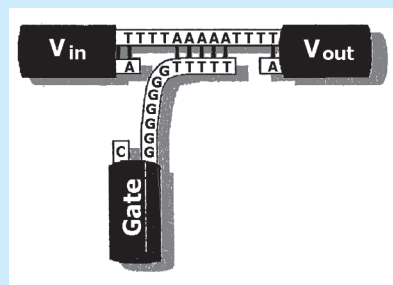
The nanotransistor scheme is shown consisting of quantum dot (QD) connected to electrodes L and R.
G – denotes the gate electrode connected to the potential V_G .

16

DNA FIELD TRANSISTOR



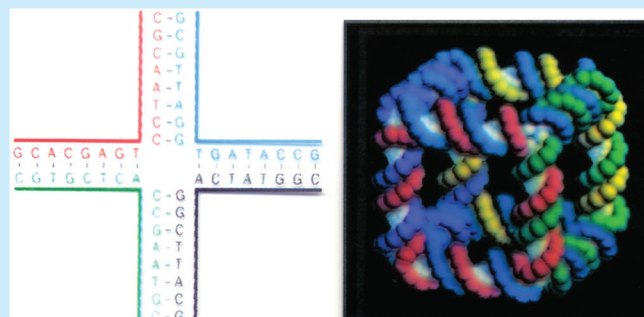
K.-H.Yoo, D.H.Ha, et al,
Phys.Rev.Lett., 2001,
87, 198102



E. Ben-Jacob et al,
patent, 2007

17

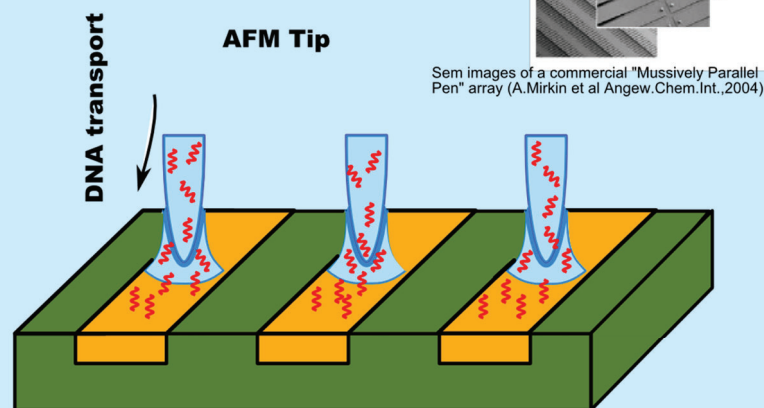
DNA nanotechnologies



The properties of DNA selfconstruction can be used
for design of different structures
(C.Dekker at al., Physics World, 2001)

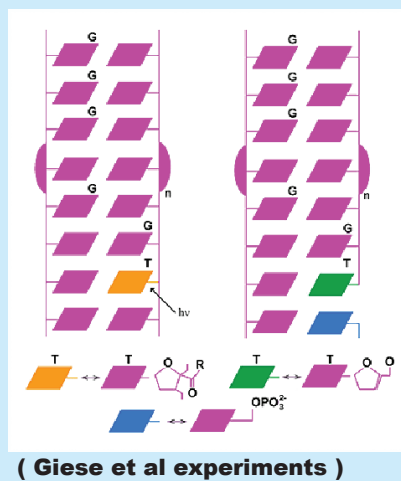
18

Dip - Pen Nanolithography



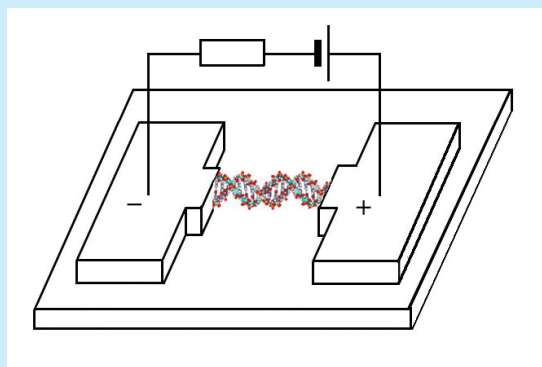
19

Hole injection into DNA



20

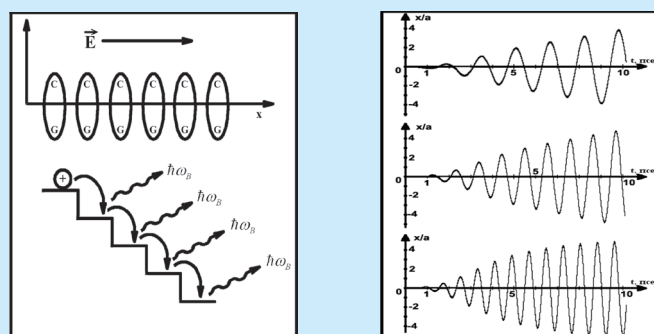
Electrical transport through DNA molecules. Direct measurement



D.Porath et al, Nature, **403**, (2000), 635

21

DNA-based molecular devices

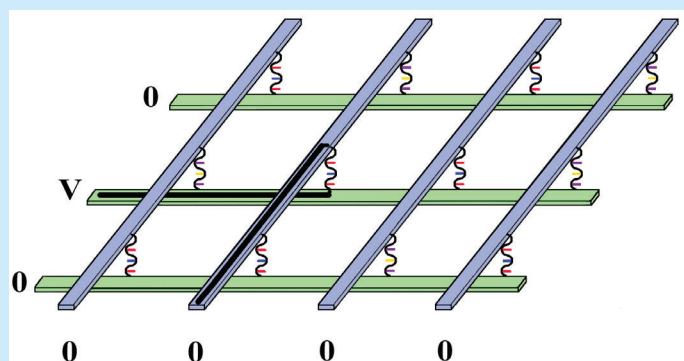


$$\hbar\Omega = n\hbar\omega_B, n = 1, 2, 3, \dots \quad \hbar\omega_B = eEa$$

- Terahertz emitters of electromagnetic waves
- Nanoelements with negative differential conductivity
- Nanoelements with absolute negative conductivity
- Multiphoton radiation detectors
- Cascade lasers

22

Nanobiochip



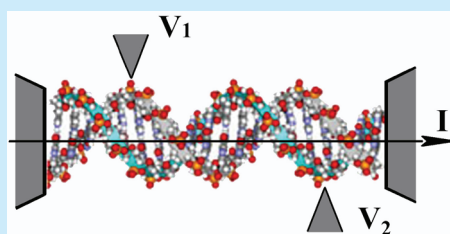
The measuring of current along the separated contour diagnoses its change after hybridization

V. D. Lakhno, V. B. Sultanov.

J. Chem. Theory Comput. 2007, 3, 703-705

23

Logical gate XOR

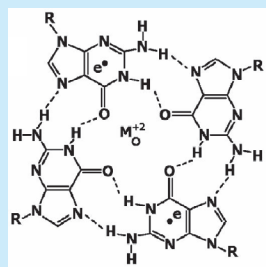


V. D. Lakhno, V. B. Sultanov.
Mathematical biology and bioinformatics,
2006, v.1 (1), pp. 123-126.

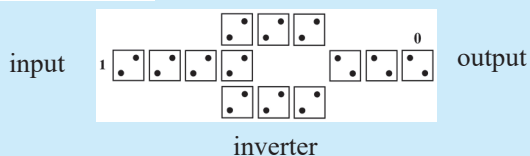
v1	v2	p
1	1	0*
1	0	1
0	1	1
0	0	0

24

DNA quantum cell



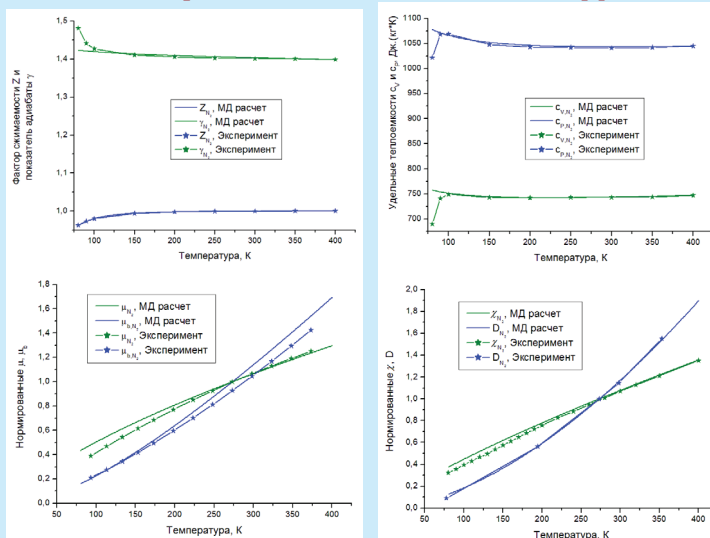
G-quadruplex



A.B.Kotlyar, D.Porath et al. Nature nanotechnology, 2014, pp. 1040-1046.

25

1. Определение макропараметров газовой среды (МД): УРС реального газа и кинетические коэффициенты



26

2. Взаимодействие газа с поверхностью металла. Прямое молекулярное моделирование

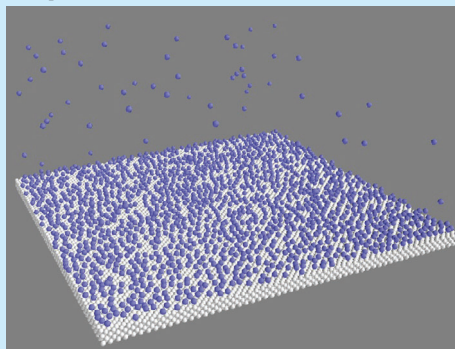
Пример: Расчет взаимодействия азота со стенками никелевого микроканала

Число частиц: $8\,128\,512 + 423\,840 = 8\,552\,352$,

Температура термостатов: $T_{Ni} = 273.15\text{ K}$, $T_{N_2} = 273.15\text{ K}$

Число шагов по времени: $1\,150\,000$ шагов, $1\text{ шаг} = 2\text{ фс}$

Размер системы: $102 \times 102 \times 1534\text{ nm}^3$

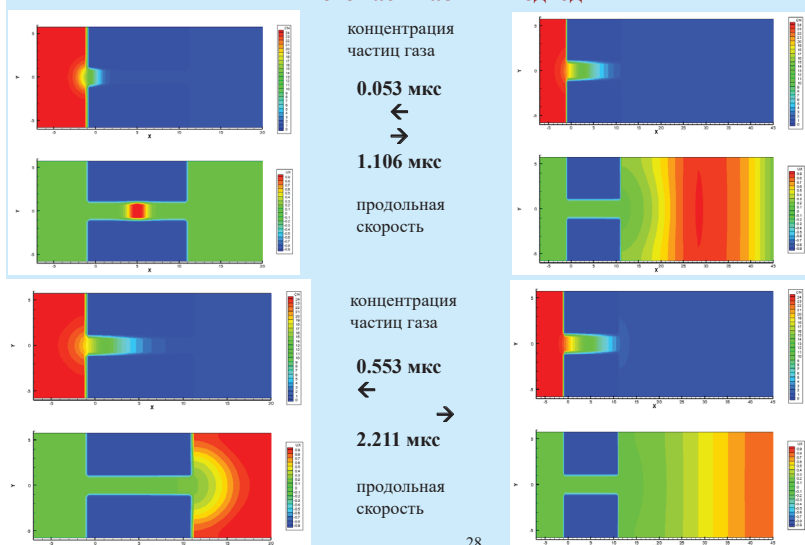


Фрагмент распределения молекул азота (область $20 \times 20\text{ nm}$) на поверхности никелевой пластины, в момент времени 2.3 ns

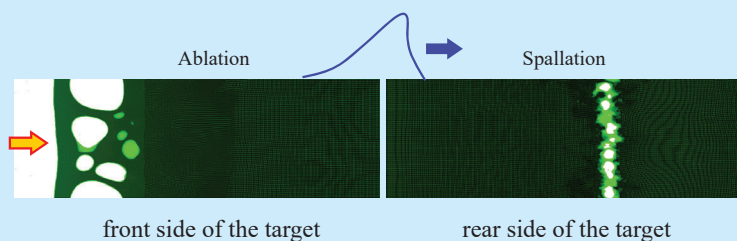
27

3. Определение параметров течения в микросопле.

Многомасштабный подход



4. Лазерное наноструктурирование металлических поверхностей Прямое молекулярное моделирование



- 1) Femtosecond laser-induced ablation and surface morphology of metals
- 2) Propagation of ultrashort shock wave and spallation of metal

29

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАДИАЦИОННОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ

Комплекс Magnetically Accelerated Radiative Plasma Explorer (MARPLE) предназначен для моделирования термомеханических полей

Основан на решении уравнений радиационной магнитной газовой динамики с теплопроводностью

Необходимо замыкание уравнений Эйлера уравнениями состояния

Необходимы данные о коэффициентах поглощения излучения плазмы, коэффициентах тепло и электропроводности

30

Программный комплекс THERMOS создан в ИПИМ им.
М.В. Келдыша РАН А.Ф. Никифоровым, В.Б. Уваровым
и
В.Г. Новиковым для вычисления свойств равновесной
плазмы в широком диапазоне температур и плотностей



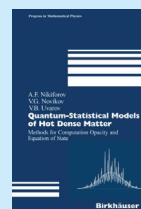
Никифоров
Арнольд Фёдорович
(1930 – 2005)



Уваров
Василий Борисович
(1929 – 1997)

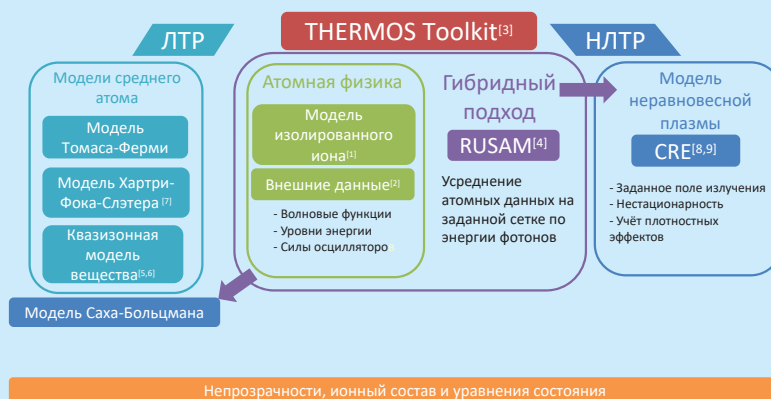


Новиков
Владимир Григорьевич
(1950 – 2015)



31

Общая структура комплекса THERMOS



32

Общая структура комплекса THERMOS

TH_TF – модели Томаса-Ферми и Томаса-Ферми с квантово-механическими поправками

TH_64gamma (THERMOS) – основной код, приближение ЛТР, сферическая атомная ячейка, граничные условия свободного атома. Теория возмущения (волновые функции электронов считаются независимыми)

TH_Sem – полуэмпирические и эмпирические модели (QEOS, UPC-11, ...).

33

Структура основного кода

TH_64gamma (THERMOS)

TH_DBa – программа расчёта базы атомных данных. Модель ХФС для фиксированных чисел заполнения. Согласованный потенциал, плотность электронов, набор волновых функций, силы осцилляторов, энергии уровней, энергии конфигураций и т.д.

TH_Band – развитие TH_64gamma, приближение ЛТР, периодические граничные условия

THa_Saha – приближение ионизационного равновесия (модель Саха), феноменологическая модель, требуются дополнительные данные

THa_NLTE – приближение столкновительно-излучательного равновесия, решение общей системы кинетических уравнений, требуются дополнительные данные (TH_DBa).

34

Основные возможности комплекса THERMOS

- Создание широкодиапазонных таблиц оптических и термодинамических свойств вещества как в равновесном приближении (ЛТР), так и с произвольным полем излучения (НЛТР)
- Возможность учитывать в расчётах неравновесное поле излучения, плотностные эффекты, наличие быстрых электронов, нестационарность, пространственную неоднородность температуры и плотности
- Описание экспериментальной плазмы в различных постановках с получением реалистичных спектров излучения и поглощения фотонов
- Возможность решения системы поуровневой кинетики совместно с уравнениями радиационной гидродинамики (in-line расчёт) для моделирования нестационарных процессов в плазме при ультракоротких воздействиях

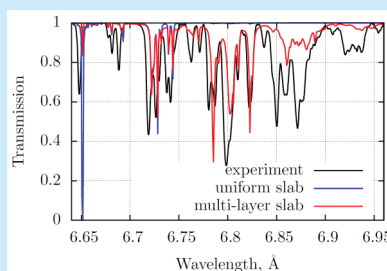
35

Пример применения: расчёт для плазмы кремния

Коэффициент
прохождения

$$T_{\omega} = \exp \{-\rho \kappa_{\omega} L\}$$

- Неравновесная модель поуровневой кинетики для неоднородного слоя и специально подобранная база атомных данных позволили с хорошей точностью описать спектр прохождения фотонов через плазму кремния из эксперимента



Параметры плазмы:
Многослойная мишень

$$L \sim 0.1 \div 1 \text{ cm} \quad Z_0 \approx 10$$

$$T_e \sim 30 \text{ eV}, N_e \sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

36

**Презентация доклада д.ф.-м.н. Владимира Владимировича Стегайлова
(Объединенный институт высоких температур РАН) «Атомистические и
многомасштабные модели вещества: теоретические методы, прикладные задачи и
суперкомпьютерные потребности»**

Научный совет РАН по материалам и наноматериалам

30 сентября 2020

**Атомистические и многомасштабные
модели вещества: теоретические методы,
прикладные задачи
и суперкомпьютерные потребности**

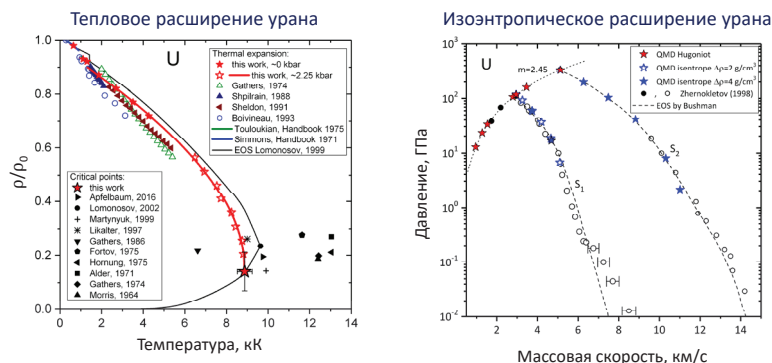
Стегайлов Владимир Владимирович
Заведующий отделом многомасштабного суперкомпьютерного моделирования
Объединенный институт высоких температур РАН



Примеры решения задач по исследованию материалов
с помощью суперкомпьютерного атомистического моделирования



ПЕРВОПРИНЦИПНАЯ ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ВОЛЬФРАМА, МОЛИБДЕНА И УРАНА



- Учет спин-орбитального взаимодействия в твердой и жидкой фазах;
- Статистический анализ и оценка погрешности критических параметров

Оценка критических параметров:
 $T_c = 8.9 \pm 0.4$ кК;
 $P_c = 2.25 \pm 0.7$ кбар;
 $\rho_c = 2.75 \pm 1.4$ г/см³;
 $Z_c = 0.26 \pm 0.13$

D.V. Minakov, M.A. Paramonov,
P.R. Levashov,
Phys. Rev. B **97**, 024205 (2018)
AIP Advances **8**, 125012 (2018)

П.Р.Левашов, ОИВТ РАН



Создание информационных систем для задач материаловедения в ОИВТ РАН



Развитие базы данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ ИВТАНТЕРМО-Онлайн

- Современный интерактивный веб-интерфейс с возможностью удаленной работы пользователей и экспертов
- Регулярные обновления данных с сохранением истории всех изменений
- Хранение исходных экспериментальных или расчетных данных, информации об их источниках, методах обработки, литературных источниках
- Расчетные веб-сервисы



Договор между ОИВТ РАН и АО «Наука и инновации»

- Современные информационные технологии (NoSQL база данных, онтологическое моделирование, инструменты BigData)
- Хранение результатов экспериментов, испытаний и компьютерного моделирования
- Обработка и анализ данных с помощью алгоритмов машинного обучения

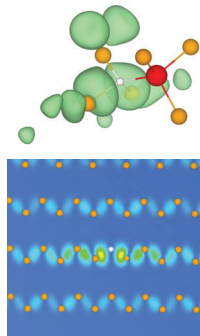
И.В.Морозов, ОИВТ РАН

Работы ВНИИА в области Компьютерного материаловедения в рамках ЕОТП «Материалы и технологии» (рук. А.В. Дуб)

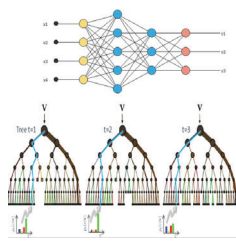
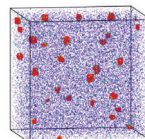
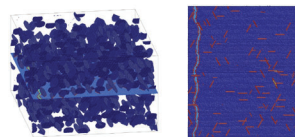


Квантово-механические расчеты:
Электронные свойства полупроводниковых материалов
Химические превращения
Создание базы данных для потенциалов межатомного взаимодействия

Классические методы молекулярного моделирования:
Эволюция радиационной дефектов
Фазовая стабильность сплавов
Пластическая деформация и разрушение материалов



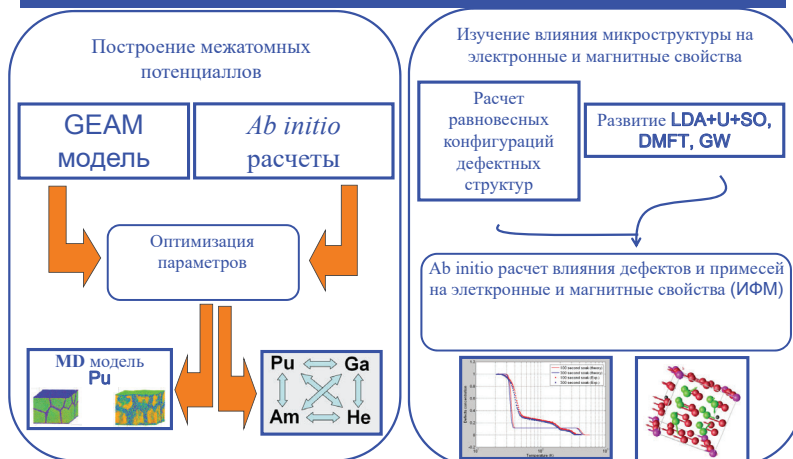
Методы машинного обучения при разработке потенциалов межатомного взаимодействия:



А.В.Янилкин, ВНИИА

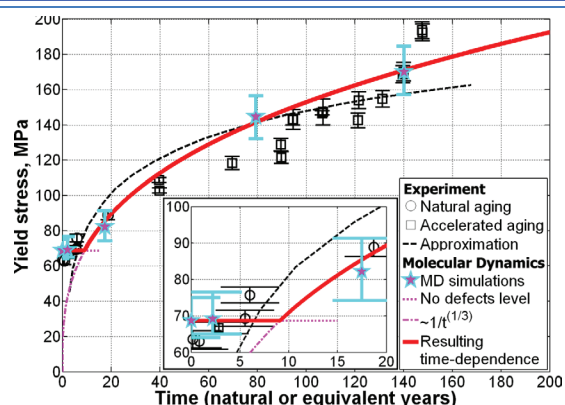
~40 млн. ядро-часов в 2019 г.

Построение модели многокомпонентных материалов



В.В.Дремов, РФЯЦ-ВНИИТФ

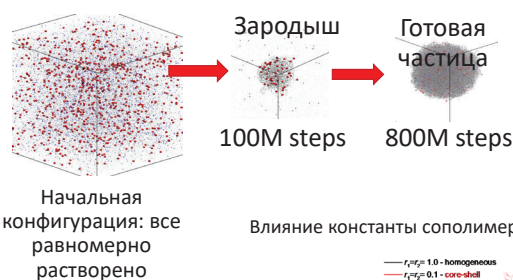
Моделирование прочностных свойств сложных соединений на примере Pu-Ga сплава



Изменение статического предела текучести материала в результате накопления радиационных повреждений и примесей
 Моделирование - ВНИИТФ (Karavaev et al., J. Nucl. Mater., 496 (2017) 85-96)
 Эксперимент - ЛЛНЛ

В.В.Дремов, РФЯЦ-ВНИИТФ

In silico синтез сложных макромолекулярных объектов – микрогелей

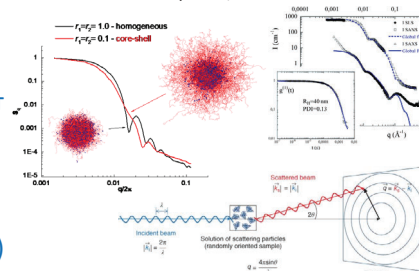


A. A. Gavrilov, V. Y. Rudyak, and A. V. Chertovich, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 574, p. 393, 2020. [DOI]

V. Y. Rudyak, E. Y. Kozhunova, and A. V. Chertovich, *Scientific reports*, vol. 9, p. 13052, 2019. [DOI]

В реальном лабораторном эксперименте этот процесс идет несколько минут, на суперкомпьютере Ломоносов-2 одна траектория – это 2 недели счета на 30 узлах (LAMMPS, 10^5 частиц, 10^9 шагов)

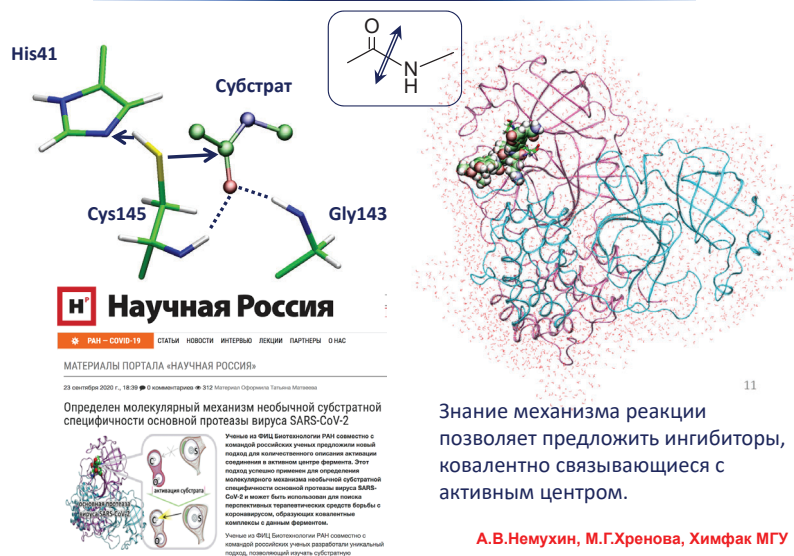
Влияние константы сополимеризации:



Полученные результаты напрямую сопоставимы с данными малоуглового рассеяния!

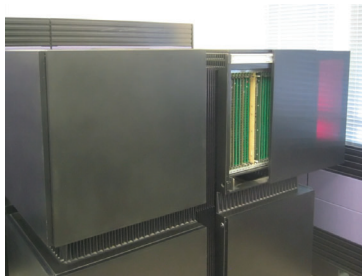
А.В.Чертович, Физфак МГУ

Протеаза M^{Pro} вируса SARS-CoV-2



Развитие суперкомпьютеров и программного инструментария для решения задач вычислительного материаловедения

Суперкомпьютеры 1986-87 гг.



Thinking Machines CM-2:
16384 однокитовых процессора совместно с 512 арифметическими ускорителями Weitek



Meiko Computing Surface:
64 транспьютерных узлов с процессорами Intel i860

В. В. Стегальов, Г. Э. Норман. Проблемы развития суперкомпьютерной отрасли в России: взгляд пользователя высокопроизводительных систем // Программные системы: теория и приложения: электрон. научн. журн. 2014. Т. 5, № 1(19), с. 111–152. URL: http://psta.psiras.ru/read/psta2014_1_111-152.pdf

... и параллельные алгоритмы для первопринципных расчетов

VOLUME 68, NUMBER 9	PHYSICAL REVIEW LETTERS	2 MARCH 1992
<i>Ab Initio</i> Theory of the Si(111)-(7×7) Surface Reconstruction: A Challenge for Massively Parallel Computation		
Karl D. Brommer, ⁽¹⁾ M. Needels, ⁽²⁾ B. E. Larson, ⁽³⁾ and J. D. Joannopoulos ⁽¹⁾ ⁽¹⁾ Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts 02139 ⁽²⁾ AT&T Bell Laboratories, 600 Mountain Avenue, Murray Hill, New Jersey 07974 ⁽³⁾ Thinking Machines, Cambridge, Massachusetts 02139 (Received 8 November 1991)		
An <i>ab initio</i> investigation of the Si(111)-(7×7) surface reconstruction is undertaken using the state of the art in massively parallel computation. Calculations of the total energy of an ~700 effective-atom supercell are performed to determine (1) the fully relaxed atomic geometry, (2) the scanning tunneling microscope images as a function of bias voltage, and (3) the energy difference between the (7×7) and the (2×1) reconstructions. The (7×7) reconstruction is found to be energetically favorable to the (2×1) surface by 60 meV per (1×1) unit cell.		
PACS numbers: 73.20- <i>r</i> , 68.35.Bs, 68.35.Md		
VOLUME 68, NUMBER 9	PHYSICAL REVIEW LETTERS	2 MARCH 1992
<i>Ab Initio</i> Total-Energy Calculations for Extremely Large Systems: Application to the Takayanagi Reconstruction of Si(111)		
I. Stich, M. C. Payne, R. D. King-Smith, and J.-S. Lin Cavendish Laboratory (TCM), University of Cambridge, Madingley Road, Cambridge CB3 0HE, United Kingdom L. J. Clarke Edinburgh Parallel Computer Centre, University of Edinburgh, Mayfield Road, Edinburgh EH9 3JZ, United Kingdom (Received 8 November 1991)		
We have implemented a set of total-energy pseudopotential codes on a parallel computer which allows calculations to be performed for systems containing many hundreds of atoms in the unit cell. Using these codes we have calculated the total energies and structures of the 3×3, 5×5, and 7×7 Takayanagi reconstructions of the (111) surface of silicon. We find that the 7×7 structure minimizes the surface energy and observe structural trends across the series which can be correlated with the degree of charge transfer between the dangling bonds on the adatoms and rest atoms.		
PACS numbers: 68.35- <i>p</i> , 31.20- <i>d</i> , 71.45.Nt		

Thinking
Machines
CM-2

Meiko
Computing
Surface

Программы для расчетов электронной структуры материалов

16468	11038	8385
3230	3222	1397
1386	699	
Бесплатные с открытым кодом		
62850	9446	731
PRIRODA		
804		
Лицензионные, с открытым кодом		Российские (МГУ)
Указано число цитирующих публикаций по Google Scholar по состоянию на сентябрь 2020 г.		

Программы для молекулярно-динамического моделирования

10509	14167
27445	
	DL_POLY
1530	931
Бесплатные с открытым кодом	
Указано число цитирующих публикаций по Google Scholar по состоянию на сентябрь 2020 г.	

Пример загрузки суперкомпьютерного центра

ARCHER (Advanced Research Computing High End Resource)
главный академический суперкомпьютерный центр Великобритании

Code Usage on ARCHER (2014-15) by CPU Time:

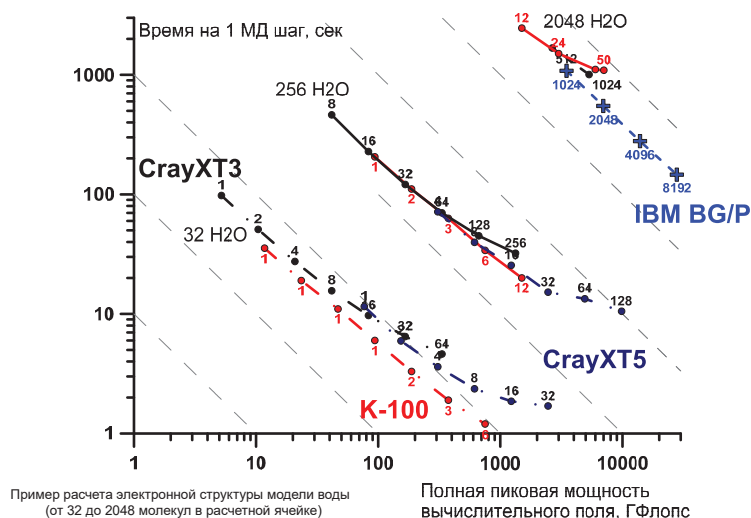
Rank	Code	Node hours	Method	GPU Acceleration
1	VASP	5,443,924	DFT	-
3	CP2K	2,121,237	DFT	<i>Partial</i>
4	CASTEP	1,564,080	DFT	<i>Partial</i>
9	LAMMPS	887,031	Classical	+
10	ONETEP	805,014	DFT	<i>Partial</i>
12	NAMD	516,851	Classical	+
20	DL_POLY	245,322	Classical	+

52% of all CPU time used by Chemistry / Materials
Science / Biomolecular Simulation

Две главные задачи суперкомпьютеров:

- а) решение сверхбольших задач
- и б) ускорение решения потока задач

Суперкомпьютерное ускорение решения одной большой задачи
(масштабируемость в сильном смысле)



Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE):

Unified European Applications Benchmark Suite

ALYA
Code_Saturne
CP2K
GADGET
GPAW
GROMACS
NAMD
NEMO
PFARM
QCD
Quantum Espresso
SHOC
SPECFEM3D
TensorFlow

14 программ для моделирования в естественных науках,
ориентированных на максимальную параллельную масштабируемость на новых суперкомпьютерах



Конкурс DOE на
три системы
преэксафлопсного
класса

Collaboration
Oak
Ridge NL
Argonne NL
Livermore NL

В экспертную группу
включены также
Los Alamos NL
Sandia NL

CORAL: Тестовые приложения

$$S = \frac{\text{производительность новой системы}}{\text{производительность текущей системы}}$$

Тесты для выделенного режима (цель — масштабируемость до 90% системы,
 $S > 4.0$ за счет увеличения размерности задачи: число атомов, узлов сетки и др.)

LSMS — **первопринципные расчеты основного состояния**

QBOX — **квантовая молекулярная динамика**

HACC — гравитационная задача N тел

Nekbone — термогидромеханика

Тесты для многозадачного режима, занимающего всю систему
(цель — одновременный запуск не менее 24 задач, $S > 6.0$):

QMCPACK — **квантовый метод Монте-Карло**

NAMD — **классическая молекулярная динамика**

CAM-SE — динамика атмосферы

AMG2013 — многосеточный солвер

MiniFE — метод конечных элементов

LULESH — гидродинамика ударно-волновых явлений

UMT2013 — перенос излучения (неструктурированные сетки)

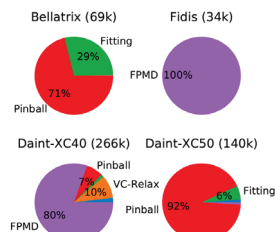
SNAP — перенос излучения (структурированные сетки)

MCB — метод Монте-Карло (задачи переноса)

Вычислительный скрининг материалов (high-throughput ab initio calculations)



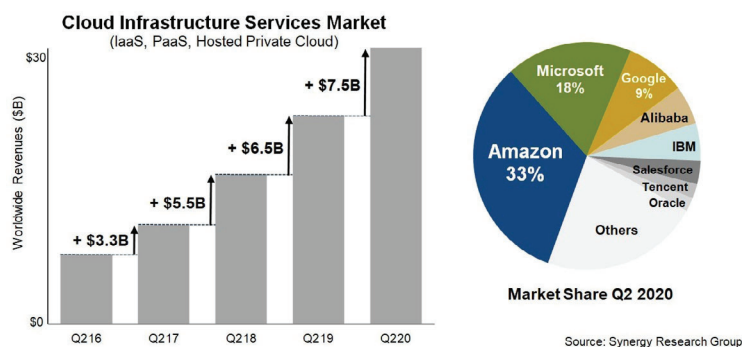
2503 SCF-расчетов
5214 релаксационных расчетов
171370 огрубленных МД расчетов
11525 ab initio МД расчетов



Итого: 509 тыс. узло-часов
= 15 млн. ядро-часов (!)

Kahle, L., Marcolongo, A., & Marzari, N. (2020). High-throughput computational screening for solid-state Li-ion conductors. *Energy & Environmental Science*, 13(3), 928-948.

Облачные вычисления



Мировой Топ-5 поставщиков «облачных HPC-ресурсов»

Успех и неуспех новых суперкомпьютерных технологий

1. Японские специализированные ускорители MD-GRAPE оказались коммерчески не эффективными после появления GPU-ускорителей
2. Intel приостановил разработку ориентированных на высокопроизводительные вычисления процессоров Intel Xeon Phi, что привело к срыву сроков создания суперкомпьютера Аврора
3. В настоящее время появляются альтернативные продуктам Nvidia технологии GPU-ускорителей от AMD и Intel. Об их успешности можно будет судить в 2021-2022 годах (но первый опыт работы в моем коллективе уже имеется)

Стратегия развития суперкомпьютеров (СК)

Деньги выделяются для создания СК
ввиду важности задач, которые на них будут решаться.

Однако СК создаются не под задачи, а под методы их решения,
ибо именно они определяют архитектуру и топологию,
т.е. на первый план выходят MD, ab initio, CFD.

Уметь объяснять на любом уровне, как из методов вырастают
задачи и формулируются требования к СК под задачи.
Использовать при этом тесты на существующих СК.

Критерии выбора СК – это не LINPACK и место в Top500,
а масштабируемость и скорость решения набора требуемых задач.

Продвинутый пользователь формулирует критерии,
которым должен удовлетворять планируемый СК.

Дело компаний-производителей – удовлетворить этим критериям
в рамках доступных энергопотребления и инфраструктуры.

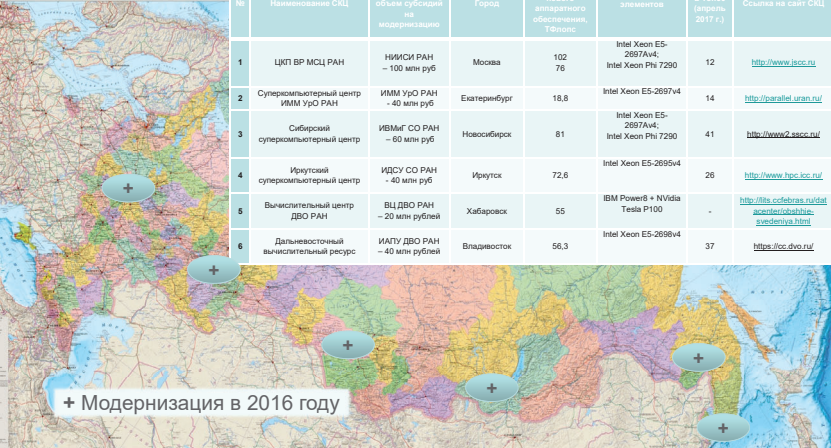
Развитие суперкомпьютерной инфраструктуры,

подготовка кадров

и использование отечественной элементной базы

Результаты модернизации суперкомпьютерных ЦКП в организациях, подведомственных ФАНО России

№	Наименование СКЦ	Научная организация – объем субсидии на модернизацию	Город	Пиковая мощность вычислительного оборудования, Терафлопс	Тип вычислительных элементов	Позиция в Top500 (апрель, 2017 г.)	Ссылка на сайт СКЦ
1	ЦКП ВР МСЦ РАН	НИИСИ РАН – 100 млн руб	Москва	102,76	Intel Xeon E5-2697Av4; Intel Xeon Phi 7290	12	http://www.jscrc.ru
2	Суперкомпьютерный центр ИММ УрО РАН	ИММ УрО РАН – 40 млн руб	Екатеринбург	18,8	Intel Xeon E5-2697v4	14	http://parallel.urpm.ru/
3	Сибирский суперкомпьютерный центр	ИВМиГ СО РАН – 60 млн руб	Новосибирск	81	Intel Xeon E5-2697Av4; Intel Xeon Phi 7290	41	http://www2.sssc.ru/
4	Иркутский суперкомпьютерный центр	ИДСУ СО РАН – 40 млн руб	Иркутск	72,6	Intel Xeon E5-2695v4	26	http://www.hpc.scc.ru/
5	Вычислительный центр ДВО РАН	ВЦ ДВО РАН – 20 млн рублей	Хабаровск	55	IBM Power8 + NVidia Tesla P100	-	http://its.ccfedras.ru/del/center/central.htm
6	Дальневосточный вычислительный ресурс	ИАТУ ДВО РАН – 40 млн рублей	Владивосток	56,3	Intel Xeon E5-2698v4	37	https://oc.dvo.ru/



На сегодня: 36 тыс. ядер = 315 млн. ядро-часов в год (2/3 в МСЦ РАН)

Необходимость обмена опытом в среде специалистов, организующих работу суперкомпьютерных центров



НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
Суперкомпьютерные дни в России

21-22 сентября 2020 г.
Два исключительно наполненных суперкомпьютерными событиями дня: научные секции, выставка, семинары, мастер-классы и многое другое.

О конгрессе О конференции » Важные даты Программа » Участникам Авторам » Регистрация

Главная » Программы » **Семинары** » Инструменты и технологии обеспечения эффективной работы суперкомпьютерных центров

Инструменты и технологии обеспечения эффективной работы суперкомпьютерных центров

Программа семинара

Понедельник, 21 сентября 2020 г., 14:45-16:45
Ведущий: Воеводин Вадим Владимирович

Мониторинг производительности суперкомпьютеров: когда нужно меньше данных
К.С. Стефанов, НИВЦ МГУ

Суперкомпьютерный центр Росгидромета. Организация технологической поддержки
Д.Д. Теплюк, ФГБУ "ВЦЭ Росгидромета"

RDS DataIO: возможности гибкого управления гиперконвергентными ИТРС системами и программно-определяемыми системами хранения данных
П. Лавренко, РСК

«Бесконечный» анализ качества работы больших суперкомпьютеров
В.В. Воеводин, П.А. Швец, НИВЦ МГУ

Тонкая настройка суперкомпьютера НИУ ВШЭ для работы под высокой нагрузкой
П.С. Костенюк, Р.А. Чулпанов, В.И. Козырев, НИУ ВШЭ

Суперкомпьютер "Говоруны" для мега сайнс проекта NISCA
Д. Подбайный, ЛИТ ОКЯИ

Суперкомпьютерный ЦКП как возможный объект критической информационной инфраструктуры
Б.М. Шабонов, А.В. Баранов, П.М. Корпанов, МСЦ РАН



Партнер конгресса



Спонсоры

Платиновые



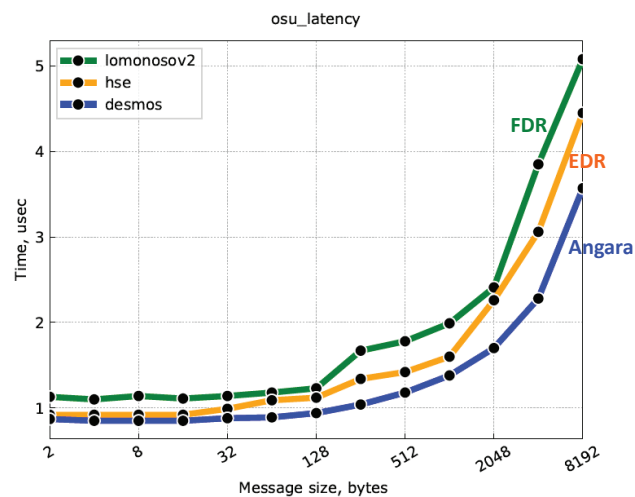


Суперкомпьютер Десмос (32 узла с GPU-ускорителями, сеть Ангара в топологии 4-х мерный тор)

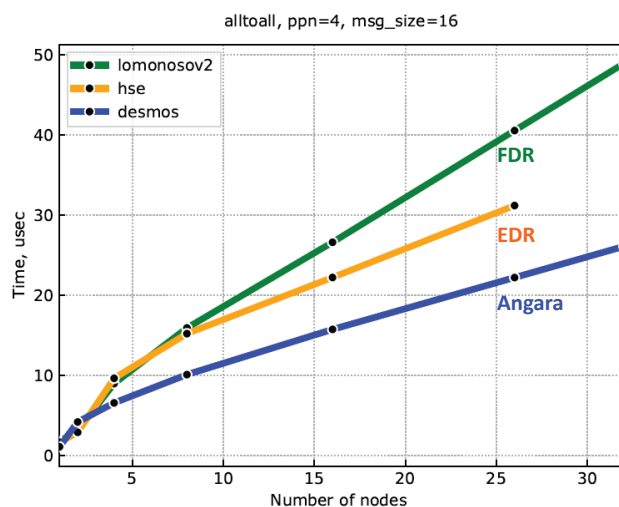


Stegailov, V., Dlinnova, E., Ismagilov, T., Khalilov, M., Kondratyuk, N., Makagon, D., ... & Timofeev, A. (2019). Angara interconnect makes GPU-based Desmos supercomputer an efficient tool for molecular dynamics calculations. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, 33(3), 507-521.

Сравнение интерконекта Ангара с Инфинибанд FDR/EDR (задержка при передаче сообщения между 2 узлами)



Сравнение интерконекта Ангара с Инфинибанд FDR/EDR (время обмена все-со-всеми для маленького размера пакета данных)

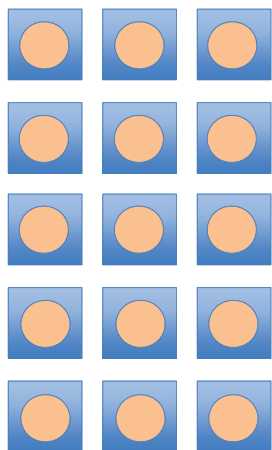


Суперкомпьютерный интерконнект: международный контекст



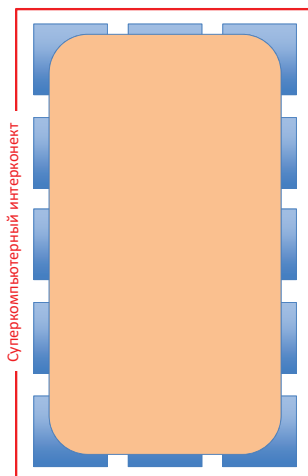
Отличие центров обработки данных и суперкомпьютеров

ЦОД



Большое число вычислительных узлов
рассчитывает поток небольших задач

Суперкомпьютер



Единое вычислительное поле позволяет
решать задачи максимального размера

Национальный Суперкомпьютерный Форум: роль в создании суперкомпьютера Десмос



Знакомство с сетью
Ангара и коллективом
ее разработчиков



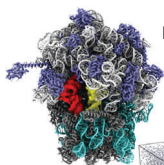
Представление тестов
наших задач на
кластере-прототипе с
сетью Ангара



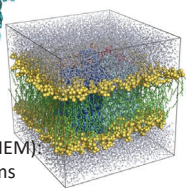
Всестороннее описание
производительности
суперкомпьютера
Десмос (№45 в Топ50)

Экономический эффект от использования специализированных гибридных архитектур

Сравнение с суперкомпьютером
IRUS17 (ИАПУ ДВО РАН)
2 x Intel Xeon E5-2699 v4 per node
with Intel Omni-Path

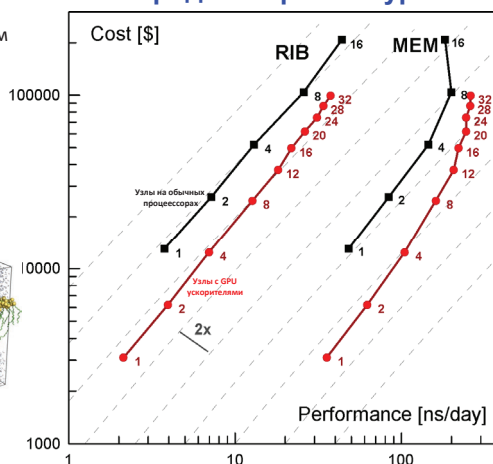


Рибосома (RIB):
2136412 atoms



Мембрана (MEM):
81743 atoms

Цены с сайта thinkmate.com
(Ноябрь 2017)



Stegailov, V., Dlinnova, E., Ismagilov, T., Khalilov, M., Kondratyuk, N., Makagon, D., ... & Timofeev, A. (2019). Angara interconnect makes GPU-based Desmos supercomputer an efficient tool for molecular dynamics calculations. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, 33(3), 507-521.



Индустриальные конкурсы по расчету свойств практических жидкостей

Проводятся в США в рамках больших конференций
с 2001 года следующими организациями:



Dow Chemical
Company



Science.
Applied to Life.

Minnesota Mining and
Manufacturing Co.



National Institute of
Standards and Technology



Army Research
Laboratory



ACS
Chemistry for Life® American
Chemical Society



United Technologies
Research Center

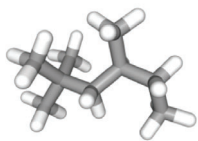
AIChE® American Institute
of Chemical Engineers

Расчеты «вслепую», эксперимент делают организаторы
Данные оглашаются на конкурсе, оценивается точность

Цель: возможности МД, где эксперимент затруднителен

Результаты 2018 и 2019

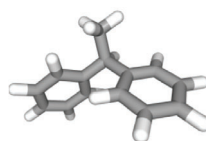
2018:



2,2,4-триметилгексан

1. Johns Hopkins, ARL
M. Cunha and M. Robbins
2. JIHT RAS, HSE, MIPT
N. Kondratyuk and V. Pisarev
3. NIST, Akron
J. Elliot and others
4. Shanghai Jiao Tong Univ.
Z. Gong and H. Sun
5. Univ. of Bath
B. Levy and C. Herdes
6. Imperial College London
E. Müller and others
7. Univ. North Dakota
J. Delhommelle and others

2019:

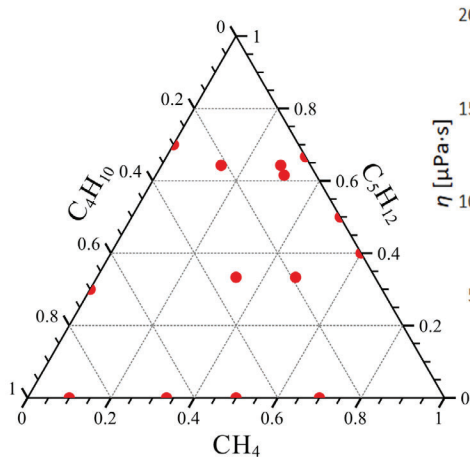
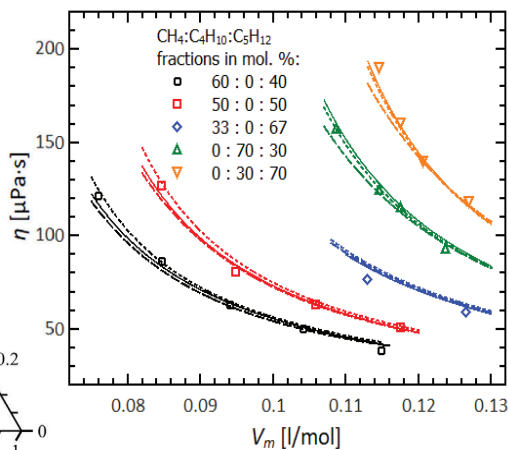


1,1-дифенилэтан

1. JIHT RAS, HSE, MIPT
N. Kondratyuk and V. Pisarev
2. Shanghai Jiao Tong Univ.
Z. Gong and H. Sun
3. Johns Hopkins, ARL
M. Cunha and M. Robbins
4. CalTech
T. Cheng and W. Goddard 3rd

V. Pisarev, N. Kondratyuk. Prediction of viscosity-density dependence of liquid methane+ n-butane+ n-pentane mixtures using the molecular dynamics method and empirical correlations. *Fluid Phase Equilib.* **501** (2019). Calculation of viscosities of branched alkanes from 0.1 to 1000 MPa by molecular dynamics methods using compass force field. *Fluid Phase Equilib.* **498**, 151 (2019).

Расчеты вязкостей смесей



V. Pisarev, N. Kondratyuk. Prediction of viscosity-density dependence of liquid methane+ n-butane+ n-pentane mixtures using the molecular dynamics method and empirical correlations. *Fluid Phase Equilib.* **501** (2019).

Заключение

1. В России сегодня работает большое число научных коллективов, использующих суперкомпьютерное атомистическое моделирование для получения прорывных результатов в области создания новых материалов.

2. Большинство подобных коллективов работает в условиях острой нехватки суперкомпьютерных ресурсов.

3. Архитектура новых суперкомпьютеров должна планироваться, исходя из потребностей конечных пользователей, их конкретных задач и используемого программного инструментария.

4. В России сформировалась сеть суперкомпьютерных центров, уровень работы которых позволяет эффективно провести интенсивную модернизацию вычислительных мощностей.

5. Имеющийся в ОИВТ РАН опыт позволяет говорить об успешном использовании отечественной элементной базы суперкомпьютеров (в первую очередь, интерконнекта).

6. Создание систем на отечественной элементной базе позволяет ускорить подготовку кадров в области суперкомпьютерных технологий.

Предложения в заключение

Инициировать 5-ти летний план модернизации суперкомпьютерных центров организаций консорциума (с включением и иных организаций) для поэтапного создания нескольких суперкомпьютеров с производительностью диапазонов от 0.5 до 1 ПФлопс, от 5 до 10 ПФлопс и от 50 до 100 ПФлопс в зависимости от специфики и объемов стоящих перед конкретными организациями задач.

В рамках плана модернизации учесть необходимость создания суперкомпьютеров с различными типами архитектуры, в том числе и суперкомпьютеров на основе отечественной элементной базы (интерконнекта, процессоров).

Презентация доклада профессора Сколковского института науки и технологий, д.ф.-м.н., Habilitation, PhD, профессора РАН А.Р. Оганова «Предсказание новых материалов и необычных веществ при помощи искусственного интеллекта»

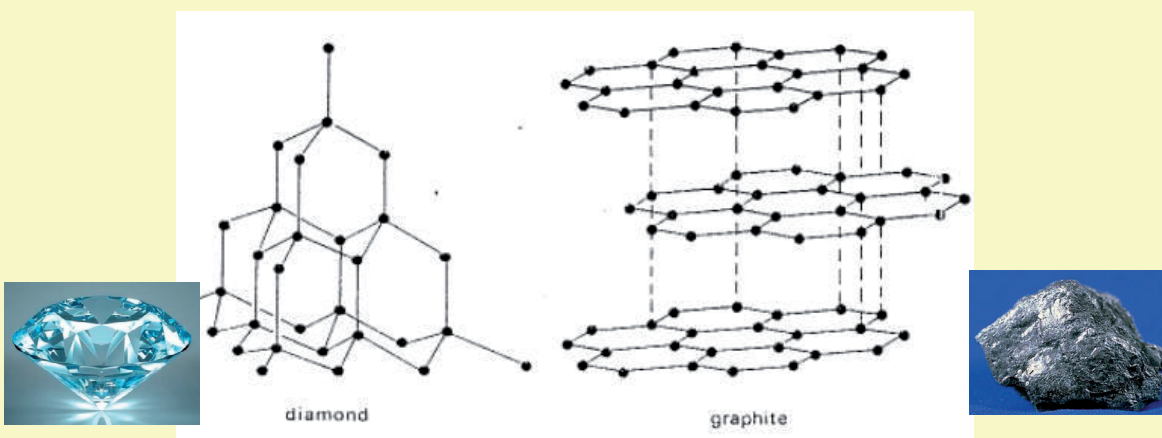
Предсказание новых материалов и необычных веществ при помощи искусственного интеллекта



Артем Р. Оганов

Сколковский Институт Науки и Технологий

Свойства вещества определяются его структурой



Пример: графит и алмаз имеют одинаковый химический состав (C), но противоположные свойства – сверхтвёрдый алмаз и сверхмягкий графит. Эти свойства объясняются различной структурой.



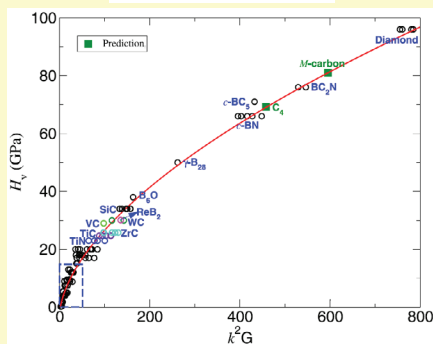
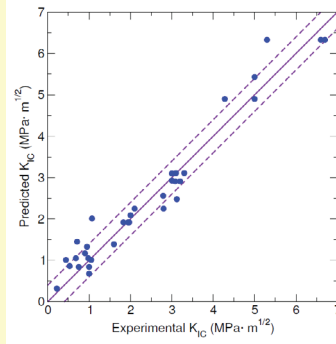
Функции биомолекул определяются их структурой



Сколтех - А.В. Шапеев, А.Р. Оганов, С.В. Левченко
ВНИИА – И.А. Круглов

A diagram of a neural network. On the left, there are four green circles labeled 'Input #1', 'Input #2', 'Input #3', and 'Input #4'. In the middle, there are five blue circles. On the right, there is one red circle labeled 'Output'. Every green circle is connected to every blue circle by a line. Every blue circle is connected to the red circle by a line.

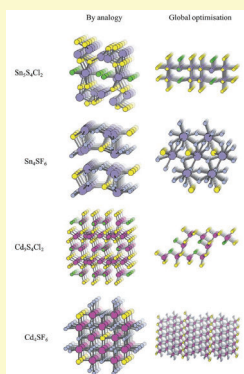
			Ti = 50	Zr = 90	Y = 180
			V = 31	Nb = 94	Ta = 183
			Cr = 52	Mo = 96	W = 186
			Mn = 55	Ru = 104.4	Pt = 197
			Fe = 56	Rh = 104.4	Ir = 196
			Co = 59	Pd = 106	Au = 198
		Ni =	Cu = 63.4	Ag = 108	Hg = 200
			Zn = 65.2	Cd = 112	
			Ga = 69	In = 114	As = 197
			Ge = 72	Sn = 118	
			As = 75	Pb = 127	Bi = 210
			S = 32	Te = 128	
			Br = 80	J = 127	
			K = 39	Rb = 85.4	Cs = 133
			Ca = 40	Sr = 87.6	Ba = 137
			Ti = 46	La = 94	
			Y = 89	Pr = 93	
			Ti = 66	La = 94	

$$K_{IC} = (1 + \alpha) \cdot V^{1/6} \cdot G \cdot (B/G)^{1/2}$$


[Mazhnik & Oganov, *J. Appl. Phys.* 2020]

A portrait of Barack Obama, President of the United States, wearing a dark suit and a blue striped tie. An American flag is visible in the background to the left.

June 2011: Materials Genome Initiative which aims to “fund computational tools, software, new methods for material characterization, and the development of open standards and databases that will make the process of discovery and development of advanced materials faster, less expensive, and more predictable”



= 118 =

Топологические методы дизайна новых материалов

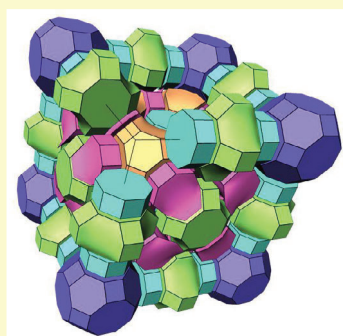
Ключевая группа в РФ:

Самарский Технологический Университет - В.А. Блатов

Предсказание новых цеолитов: подходы Вороного и 3D-мозаик

Гипотетический цеолит ISC-1

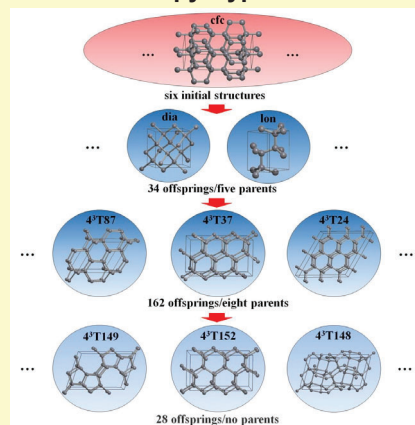
Predicted: Blatov *et al.*, *Glass Phys. Chem.* 2010



Synthesized in 2018:

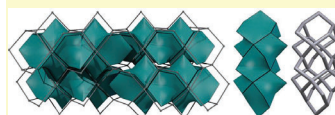


Генерирование новых неорганических кристаллических структур: топологический подход



224 новых
аллотропов
углерода

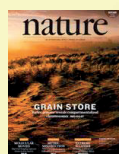
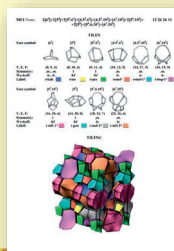
Parents < 0.2 eV



Новый сверхтвердый аллотроп
углерода 4³T16-CA, $H_v = 91.16$ ГПа

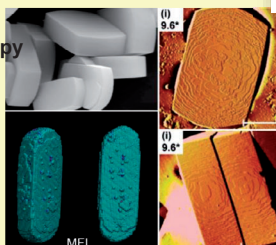
Blatov *et al.*, 2020, submitted

Моделирование роста кристаллов на основе 3D-мозаик



Zeolite MFI

Scanning Electron Microscopy picture



Modeling results



Atomic-force microscopy pictures

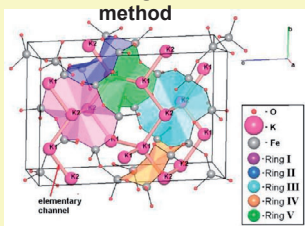
14

Совместное использование топологических и квантовых методов

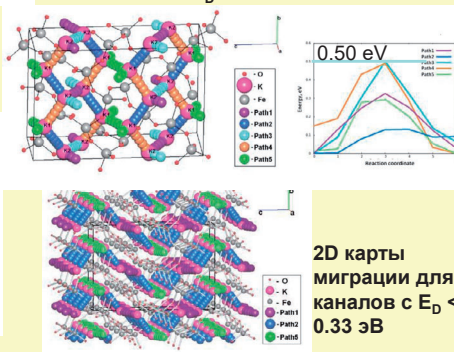
$$D = D_0 \exp(-E_D / kT)$$

KFeO_2
 $\sigma = 0.025 \text{ Sm/cm}$ at 900 K
 $E_D = 0.55 \text{ eV}$

Tiling method



$E_D = 0.14 - 0.50 \text{ эВ}$



2D карты миграции для каналов с $E_D < 0.33 \text{ эВ}$

15

Предсказание кристаллических структур как ключ к дизайну материалов

Ключевая группа в РФ:

Сколтех - А.Р. Оганов

Acc. Chem. Res. 1994, 27, 309–314

Are Crystal Structures Predictable?

ANGELO GAVEZZOTTI*

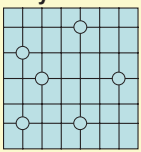


“No”: by just writing down this concise statement, in what would be the first one-word paper in the chemical literature, one could safely summarize the present state of affairs

ONE of the continuing scandals in the physical sciences is that it remains in general impossible to predict the structure of even the simplest crystalline solids from a knowledge of their chemical composition. Who, for example, would guess that graphite, not diamond, is the thermodynamically stable allotrope of carbon at ordinary temperature and pressure? Solids such as crystalline water (ice) are still thought to lie beyond mortals' ken.

J. Maddox
(*Nature*, 1988)

Задача – найти ГЛОБАЛЬНЫЙ минимум энергии. Перебором задач не решить

$$C = \frac{1}{(V/\delta^3) [(V/\delta^3) - N]! N!}$$


N _{atoms}	Variants	CPU time
1	1	1 sec.
10	10 ¹¹	10 ³ yrs.
20	10 ²⁵	10 ¹⁷ yrs.
30	10 ³⁹	10 ³¹ yrs.

RESEARCH NEWS

Crystal structure prediction – evolutionary or revolutionary crystallography?

S. L. Chaplot and K. R. Rao CURRENT SCIENCE, VOL. 91, NO. 11, 10 DECEMBER 2006

Публикация о нашем методе USPEX (Oganov & Glass, *J.Chem.Phys.* 2006)

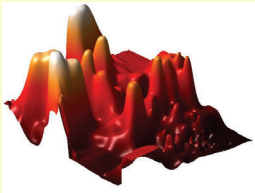
Проект USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography)

<http://uspex-team.org>

[Oganov A.R., Glass C.W., *J.Chem.Phys.* 124, 244704 (2006)]

- Сочетание эволюционного алгоритма и квантовомеханических расчетов.
- >7000 пользователей.

•Решает «нерешаемую» задачу предсказания структуры вещества



Энергетический ландшафт Au₈Pd₄



Э. Шрёдингер



У. Кон

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} + v_{e-n}[\rho(\mathbf{r})] + v_H[\rho(\mathbf{r})] + v_{xc}[\rho(\mathbf{r})]\right)\phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r})$$

$$E_{GGA,xc} = \int d\mathbf{r} F_{xc}(\rho, \frac{|\nabla\rho|}{2k_F(\rho)}) \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_x[\rho(\mathbf{r})]$$

Книги и обзоры по теме

Faraday Discussions

Cite this: *Faraday Discuss.*, 2018, 211, 643

PAPER

View Article Online
View Journal | View Issue

Crystal structure prediction: reflections on present status and challenges

Artem R. Oganov  abc

Received 30th August 2018, Accepted 30th August 2018

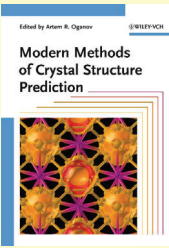
Faraday Discussions (2018)

REVIEWS

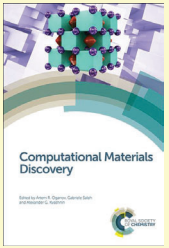
Structure prediction drives materials discovery

Artem R. Oganov^{1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20,21,22,23,24,25,26,27,28,29,30,31,32,33,34,35,36,37,38,39,40,41,42,43,44,45,46,47,48,49,50,51,52,53,54,55,56,57,58,59,60,61,62,63,64,65,66,67,68,69,70,71,72,73,74,75,76,77,78,79,80,81,82,83,84,85,86,87,88,89,90,91,92,93,94,95,96,97,98,99,100,101,102,103,104,105,106,107,108,109,110,111,112,113,114,115,116,117,118,119,120,121,122,123,124,125,126,127,128,129,130,131,132,133,134,135,136,137,138,139,140,141,142,143,144,145,146,147,148,149,150,151,152,153,154,155,156,157,158,159,160,161,162,163,164,165,166,167,168,169,170,171,172,173,174,175,176,177,178,179,180,181,182,183,184,185,186,187,188,189,190,191,192,193,194,195,196,197,198,199,200,201,202,203,204,205,206,207,208,209,210,211,212,213,214,215,216,217,218,219,220,221,222,223,224,225,226,227,228,229,230,231,232,233,234,235,236,237,238,239,240,241,242,243,244,245,246,247,248,249,250,251,252,253,254,255,256,257,258,259,260,261,262,263,264,265,266,267,268,269,270,271,272,273,274,275,276,277,278,279,280,281,282,283,284,285,286,287,288,289,290,291,292,293,294,295,296,297,298,299,300,301,302,303,304,305,306,307,308,309,310,311,312,313,314,315,316,317,318,319,320,321,322,323,324,325,326,327,328,329,330,331,332,333,334,335,336,337,338,339,340,341,342,343,344,345,346,347,348,349,350,351,352,353,354,355,356,357,358,359,360,361,362,363,364,365,366,367,368,369,370,371,372,373,374,375,376,377,378,379,380,381,382,383,384,385,386,387,388,389,390,391,392,393,394,395,396,397,398,399,400,401,402,403,404,405,406,407,408,409,410,411,412,413,414,415,416,417,418,419,420,421,422,423,424,425,426,427,428,429,430,431,432,433,434,435,436,437,438,439,440,441,442,443,444,445,446,447,448,449,450,451,452,453,454,455,456,457,458,459,460,461,462,463,464,465,466,467,468,469,470,471,472,473,474,475,476,477,478,479,480,481,482,483,484,485,486,487,488,489,490,491,492,493,494,495,496,497,498,499,500,501,502,503,504,505,506,507,508,509,510,511,512,513,514,515,516,517,518,519,520,521,522,523,524,525,526,527,528,529,530,531,532,533,534,535,536,537,538,539,540,541,542,543,544,545,546,547,548,549,550,551,552,553,554,555,556,557,558,559,560,561,562,563,564,565,566,567,568,569,570,571,572,573,574,575,576,577,578,579,580,581,582,583,584,585,586,587,588,589,590,591,592,593,594,595,596,597,598,599,600,601,602,603,604,605,606,607,608,609,610,611,612,613,614,615,616,617,618,619,620,621,622,623,624,625,626,627,628,629,630,631,632,633,634,635,636,637,638,639,640,641,642,643,644,645,646,647,648,649,650,651,652,653,654,655,656,657,658,659,660,661,662,663,664,665,666,667,668,669,670,671,672,673,674,675,676,677,678,679,680,681,682,683,684,685,686,687,688,689,690,691,692,693,694,695,696,697,698,699,700,701,702,703,704,705,706,707,708,709,710,711,712,713,714,715,716,717,718,719,720,721,722,723,724,725,726,727,728,729,730,731,732,733,734,735,736,737,738,739,740,741,742,743,744,745,746,747,748,749,750,751,752,753,754,755,756,757,758,759,760,761,762,763,764,765,766,767,768,769,770,771,772,773,774,775,776,777,778,779,780,781,782,783,784,785,786,787,788,789,790,791,792,793,794,795,796,797,798,799,800,801,802,803,804,805,806,807,808,809,810,811,812,813,814,815,816,817,818,819,820,821,822,823,824,825,826,827,828,829,830,831,832,833,834,835,836,837,838,839,840,841,842,843,844,845,846,847,848,849,850,851,852,853,854,855,856,857,858,859,860,861,862,863,864,865,866,867,868,869,870,871,872,873,874,875,876,877,878,879,880,881,882,883,884,885,886,887,888,889,890,891,892,893,894,895,896,897,898,899,900,901,902,903,904,905,906,907,908,909,910,911,912,913,914,915,916,917,918,919,920,921,922,923,924,925,926,927,928,929,930,931,932,933,934,935,936,937,938,939,940,941,942,943,944,945,946,947,948,949,950,951,952,953,954,955,956,957,958,959,960,961,962,963,964,965,966,967,968,969,970,971,972,973,974,975,976,977,978,979,980,981,982,983,984,985,986,987,988,989,990,991,992,993,994,995,996,997,998,999,1000}

Nature Reviews Materials (2019)

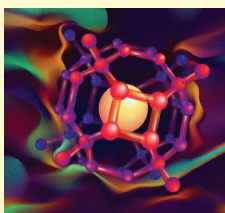


2011

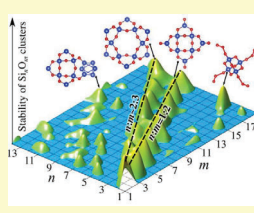


2018

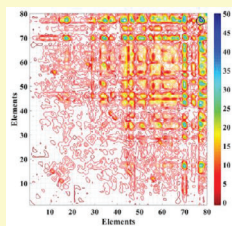
Новые теоретические методы позволяют предсказать новые явления и новые материалы



Предсказание стабильных структур и составов



Предсказание наиболее вероятных молекул

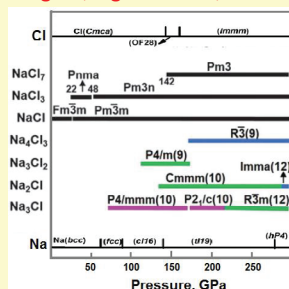


Можно ли предсказать наилучший материал среди всех возможных соединений?

Необычная химия самого обычного вещества

Na-Cl

Na_3Cl , Na_2Cl , Na_3Cl_2 , NaCl , NaCl_3 , NaCl_7 устойчивы под давлением
[Zhang W., Oganov A.R., et al. *Science* 342, 1502-1505]

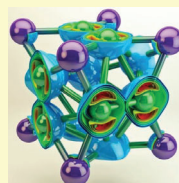
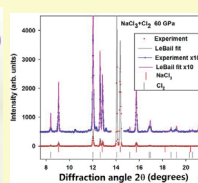
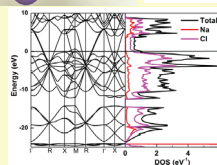


Области устойчивости хлоридов натрия

Химические аномалии:

Двухвалентный хлор в Na_2Cl .

Сосуществование металлических и ионных блоков в Na_3Cl .



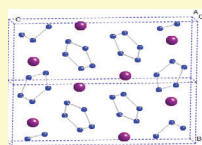
NaCl_3 : атомная и электронная структура, и дифракционный спектр

[Zhang, Oganov, et al., *Science* (2013)]

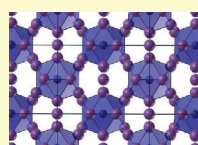
[Saleh & Oganov, *PCCP* (2015)]

Полинитриды: высокоэнергетические материалы при умеренных давлениях

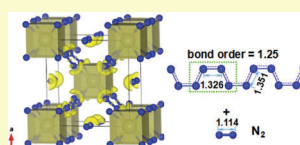
[Shen & Oganov, 2015; Zhang & Oganov, 2017; Yu & Oganov, 2017]



P21/c-LiN_5 :
>14 ГПа



$\text{Immm-Li}_{13}\text{N}$ ($[\text{Li}]^+[\text{NLi}_{12}]^-$):
>14 ГПа



HfN_{10} : >23 ГПа

$$D = 1.01(\text{NM}^{0.5}\text{Q}^{0.5})^{0.5}(1+1.30\rho)$$

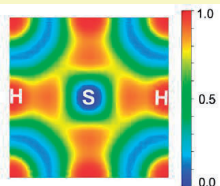
$$P = 15.58\rho^2\text{NM}^{0.5}\text{Q}^{0.5}$$

Плотность энергии и скорость детонации:

CrN_4 :	2.0 kJ/g	-
MgN_4 :	2.5 kJ/g	11.5 km/s
HfN_{10} :	2.8 kJ/g	-
TiN_{10} :	5.2 kJ/g	-
HMX:	5.7 kJ/g	9.1 km/s
TNT:	4.3 kJ/g	~6.9 km/s
$\text{Pb}(\text{N}_3)_2$:	2.6 kJ/g	~3.8 km/s

Новый рекорд сверхпроводимости, полученный благодаря USPEX

H-S



Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system

A. P. Drozdov, M. I. Eremin, I. A. Troyan, V. Ksenofontov & S. I. Shylin

Nature (2015) | doi:10.1038/nature14964

Received 25 June 2015 | Accepted 22 July 2015 | Published online 17 August 2015

A superconductor is a material that can conduct electricity without resistance below a superconducting transition temperature, T_c . The highest T_c that has been achieved to date is in the copper oxide system¹, 133 kelvin at ambient pressure² and 164 kelvin at high pressures³. As the nature of superconductivity in these materials is still not fully understood (they are not conventional superconductors), the prospects for achieving still higher transition temperatures by this route are not clear. In contrast, the Bardeen–Cooper–Schrieffer theory of conventional superconductivity gives a guide for achieving high T_c with no theoretical upper bound—all that is needed is a favourable combination of high-frequency phonons, strong electron–phonon coupling, and a high density of states⁴. These conditions can in principle be fulfilled for metallic hydrogen and covalent compounds dominated by hydrogen^{5,6}, as hydrogen atoms provide the necessary high-frequency phonon modes as well as the strong electron–phonon coupling. Numerous calculations support this idea and have predicted transition temperatures in the range 50–235 kelvin for many hydrides⁷, but only a moderate T_c of 17 kelvin has been observed experimentally⁸. Here we investigate sulfur hydride⁹, where a T_c of 60 kelvin has been predicted¹⁰. We find that this system transforms to a metal at a pressure of approximately 90 gigapascals. On cooling, we see signatures of superconductivity: a sharp drop of the resistivity to zero and a decrease of the transition temperature with magnetic field, with magnetic susceptibility measurements confirming a T_c of 203 kelvin. Moreover, a pronounced isotope shift of T_c in sulfur deutride is suggestive of an electron–phonon mechanism of superconductivity that is consistent with the Bardeen–Cooper–Schrieffer scenario. We argue that the phase responsible for high- T_c superconductivity in this system is likely to be H_3S , formed from H_2S by decomposition under pressure. These findings raise hope for the prospects for achieving room-temperature superconductivity in other hydrogen-based materials.

OPEN Pressure-induced metallization of dense $(H_2S)_2H_2$ with high- T_c superconductivity

SUBJECT AREAS: THEORETICAL AND COMPUTATIONAL PHYSICS

Deqing Duan^{1,2}, Yuxian Liu¹, Fubo Tian¹, Du Li¹, Xiaoli Huang¹, Zhongsheng Zhou¹, Hongyu Yu¹, Bingling Gu¹, Weijiang Tian¹ & Tian Cui¹

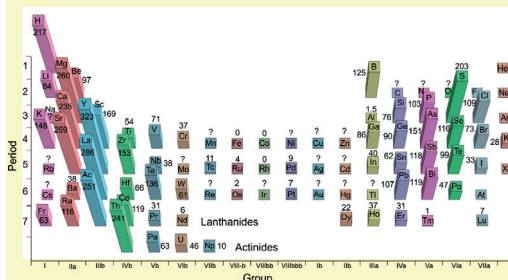
Received 7 July 2014
Accepted 29 September 2014
Published 10 November 2014

Correspondence and requests for materials should be addressed to T.C. (t.cui@tsinghua.edu.cn).

DOI:10.1038/nature14964

Рекорд $T_c=135$ K (Schilling, 1993) побит: теоретики (группа Т. Cui, 2014) предсказали новое вещество H_3S с $T_c=200$ K. Это было подтверждено экспериментами (группа М. Еремца, 2015).

Связь сверхпроводимости и химии: гипотеза и тест на Ac-H и Th-H [Semenok & Oganov, JPCL, 2018] [Semenok & Oganov, Curr. Opin. Solid State & Mater. Sci., 2020]

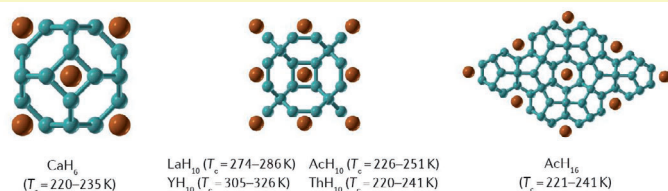


LaH_{10} : рекорд (260 K @ 190 ГПа) (Somayazulu et al., 2019).

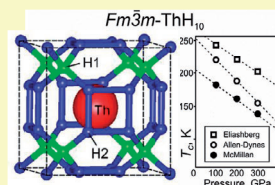
Тест идеи: гидриды Th и Ac имеют высокую T_c .

ThH_{10} : $T_c=241$ K при 100 ГПа (Kvashnin & Oganov, 2018).

Атом металла ОЧЕНЬ важен!

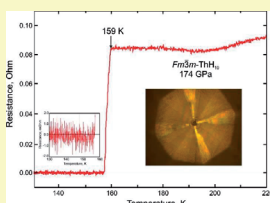
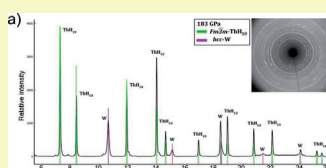


Гидрид тория ThH_{10} ($T_c = 159-161$ K) [Semenok, Troyan, Oganov, Materials Today 2019]

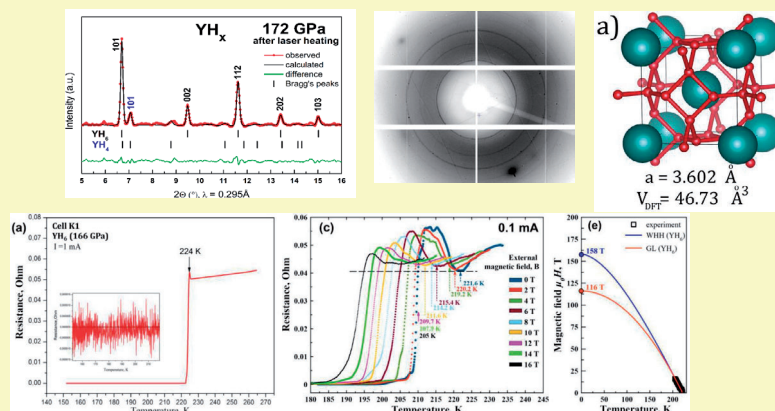


Соединение ThH_{10} было предсказано нами в 2018 году

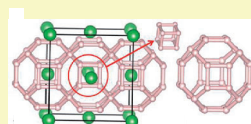
и уже через год синтезировано в алмазной ячейке при 174 ГПа!



Гидрид иттрия YH_6 ($T_c = 224$ К, $B_c = 116$ -158 Тесла) [Semenok, Troyan, Oganov, submitted]



...новый рекорд: LaH_{10} ($T_c = 250$ -260 К при 170 ГПа)

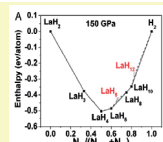


Максимальная $T_c \sim 250$ -260 К

Potential high- T_c superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure

Henry Liu¹, Ivan I. Naumov², Rauld Hoffmann³, M. W. McElroy⁴, and Russell J. Hemley^{1,5}

¹Department of Chemistry, Cornell University, Ithaca, NY 14853; ²Department of Chemistry and Chemical Biology, Cornell University, Ithaca, NY 14853; ³Department of Physics and Astronomy, Cornell University, Ithaca, NY 14853; ⁴Department of Applied and Engineering Physics, Cornell University, Ithaca, NY 14853; ⁵Department of Earth and Atmospheric Sciences, Cornell University, Ithaca, NY 14853



Superconductivity at 215 K in lanthanum hydride at high pressures

A. P. Drozdov, V. S. Minkov, S. P. Besedin, P. P. Kong, M. A. Kuzovnikov, D. A. Knyazev, M. I. Erements

Submitted on 21 Aug 2018

Evidence for superconductivity above 260 K in lanthanum superhydride at megabar pressures

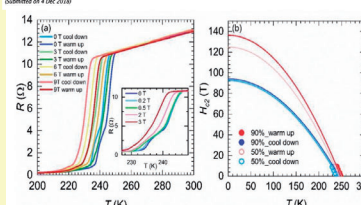
Maddury Somayazulu, Muhtar Ahart, Ajay K Mishra, Zachary M. Geballe, Maria Biddini, Yue Meng, Viktor Y. Struzhkin, Russell J. Hemley

Submitted on 23 Aug 2018 (v1), last revised 29 Aug 2018 (this version, v2)

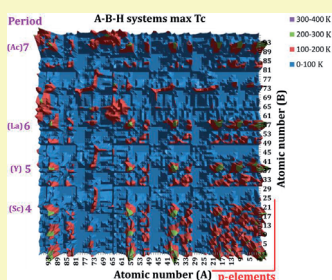
Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures

A. P. Drozdov, P. P. Kong, V. S. Minkov, S. P. Besedin, M. A. Kuzovnikov, S. Mozaffari, L. Balicas, F. Balakirev, D. Graf, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, D. A. Knyazev, M. Tkacz, M. I. Erements

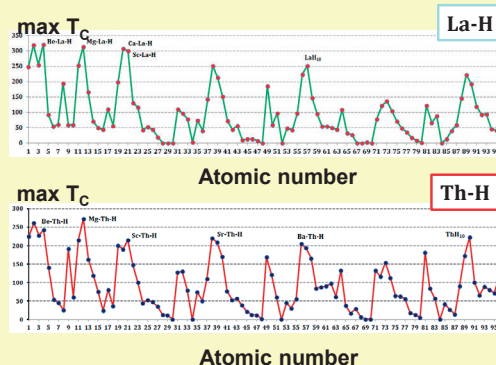
Submitted on 4 Dec 2018



Предсказания T_c для тройных гидридов



Тройные гидриды могут иметь более высокую T_c при более низких давлениях



...и рекорд побит снова, и комнатная сверхпроводимость достигнута для соединения S-C-H (Tc = 288 K at 267 GPa)

Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride

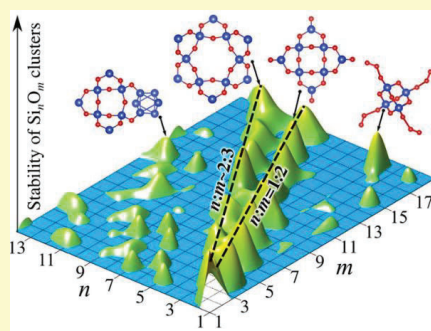
Elliot Snider, Nathan Dasenbrock-Gammon, Raymond McBride, Mathew Debessai, Hiranya Vindana, Kevin Vencatasamy, Keith V. Lawler, Ashkan Salamat & Ranga P. Dias

Nature **586**, 373–377(2020) | [Cite this article](#)

One of the long-standing challenges in experimental physics is the observation of room-temperature superconductivity^{1–3}. Recently, high-temperature conventional superconductivity in hydrogen-rich materials has been reported in several systems under high pressure^{4–11}. An important discovery leading to room-temperature superconductivity is the pressure-driven disproportionation of hydrogen sulfide (H₂S) to H₃S, with a confirmed transition temperature of 203 kelvin at 155 gigapascals¹². Both H₂S and CH₄ readily mix with hydrogen to form gases: host structures at lower pressures¹³ and are of comparable size at 4 gigapascals. By introducing methane at low pressures into the H₂S + H₂ precursor mixture for H₃S, molecular exchange is allowed within a large assemblage of van der Waals solids that are hydrogen rich with H₂ inclusions; these guest–host structures become the building blocks of superconducting compounds at extreme conditions. Here we report superconductivity in a photochemically transformed carbonaceous sulfur hydride system, starting from elemental precursors, with a maximum superconducting transition temperature of 287.7 ± 1.2 kelvin (about 15 degrees Celsius) achieved at 267 ± 10 gigapascals. The superconducting state is observed over a broad pressure range in the diamond anvil cell, from 140 to 275 gigapascals, with a sharp upturn in transition temperature above 220 gigapascals. Superconductivity is established by the observation of zero resistance, a magnetic susceptibility of up to 190 gigapascals, and reduction of the transition temperature under an external magnetic field of up to 9 tesla, with an upper critical magnetic field of about 62 tesla according to the Ginzburg–Landau model at zero temperature. The light, quantum nature of hydrogen limits the structural and stoichiometric determination of the system by X-ray scattering techniques, but Raman spectroscopy is used to probe the chemical and structural transformations before metallization. The introduction of chemical tuning within our ternary system could enable the preservation of the properties of room-temperature superconductivity at lower pressures.

Стабильные наночастицы и их неожиданная химия [Lepeshkin & Oganov, *J. Phys. Chem. Lett.* 2019]

Si-O

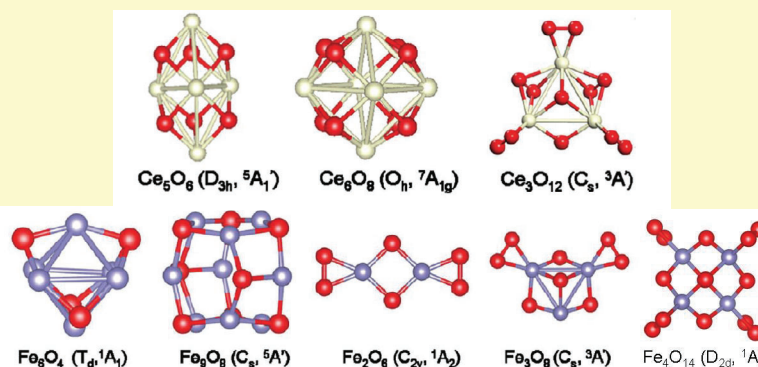


Хребты стабильности: SiO₂, Si₂O₃
Острова стабильности: Si₄O₁₈ и тд.

Карта стабильности нанокластеров Si-O

Необычные составы стабильных наночастиц оксидов переходных металлов

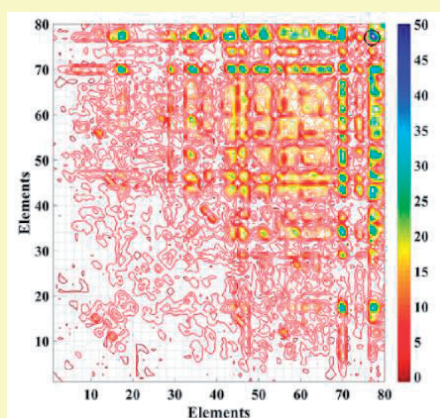
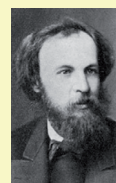
[Yu & Oganov, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018]



Не из таких ли частиц образуется кристалл?

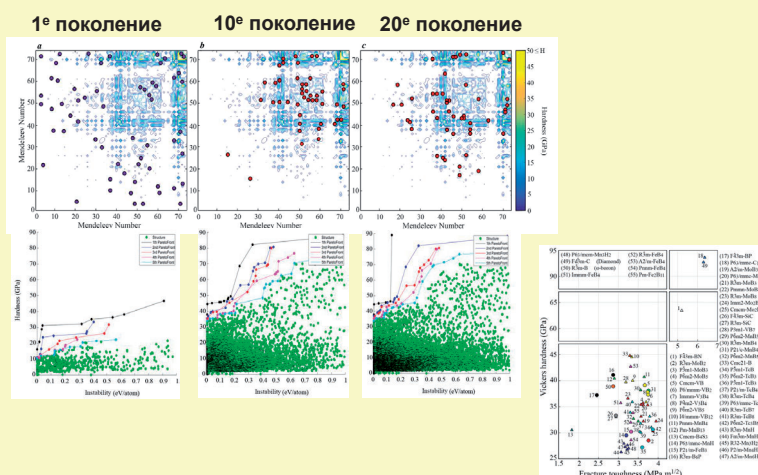
Как предсказать лучший материал из всех возможных соединений?

[Allahyari & Oganov, *NPJ Computational Materials*, 2020]



Менделеевский поиск самого твердого материала: находит алмаз и лонсдейлит!

(Allahyari & Oganov, *NPJ Computational Materials*, 2020)



Некоторые программы, созданные в РФ

- USPEX <http://uspex-team.org> (Сколтех)
- ToposPro <http://topospro.com> (СамТУ)
- MLIP <http://mlip.skoltech.ru> (Сколтех)
- AMULET <http://amulet-code.ru> (УрФУ, ИФМ РАН)
- Базы данных Н.Н. Киселевой: <http://lab11.imet-db.ru/ru/main.asp?databases> (ИМЕТ РАН)

Частично российские:

- ABINIT <http://abinit.org> (Сколтех)
- FHI-aims <https://aimsclub.fhi-berlin.mpg.de/> (Сколтех)

**Презентация доклада Первого заместителя генерального директора АО «Наука и инновации» ГК «Росатом», д.т.н., профессора Алексея Владимировича Дуба
«Развитие компьютерного материаловедения для отбора кандидатных материалов перспективных ядерных технологий»**



Развитие компьютерного материаловедения для отбора кандидатных материалов перспективных ядерных технологий

Научный совет РАН по материалам и наноматериалам

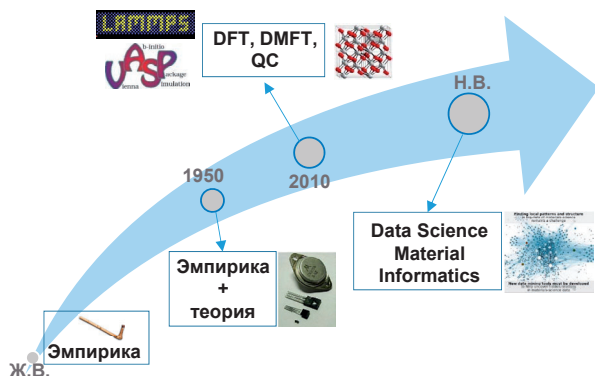
ДУБ АЛЕКСЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ

Первый заместитель генерального директора
АО «Наука и инновации (Госкорпорация «Росатом»)

Роль компьютерного материаловедения в концепции разработки методик отбора кандидатных материалов (1/2)



Проекты, центры и базы данных в области компьютерного материаловедения

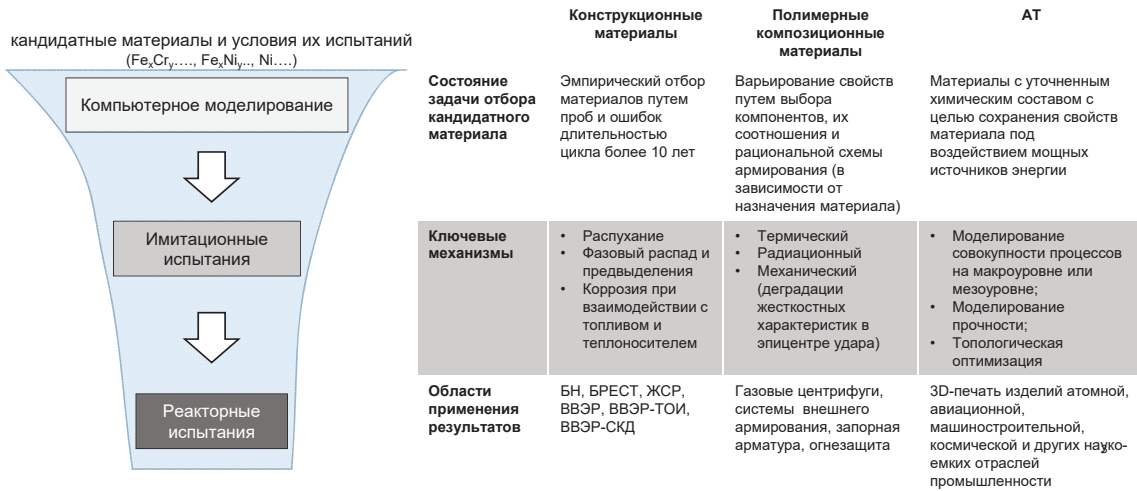


Проекты, центры и базы данных в области компьютерного материаловедения

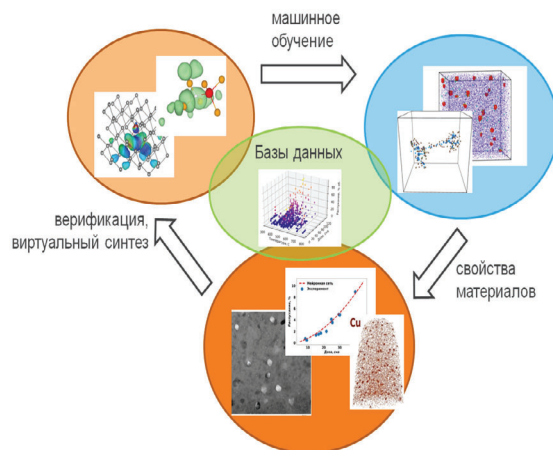


В мире компьютерное моделирование материалов и информационные системы используются как для поиска² новых материалов, так и для обоснования и внедрения существующих в том числе в виде цифровых двойников

Роль компьютерного материаловедения в концепции разработки методик отбора кандидатных материалов (2/2)



Идеология проектов – взаимное дополнение моделирования, экспериментов и баз данных

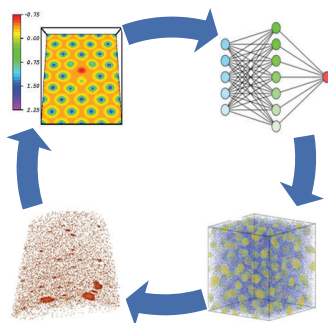


4

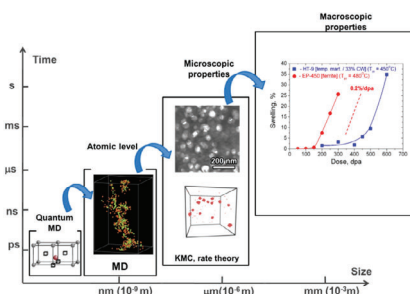
Ключевые направления работ по компьютерному материаловедению (1/3)



1. Разработка моделей и программ для прогноза распухания феррито-мартенситных и аустенитных сталей



2. Разработка модели и программ для прогноза фазовой стабильности и образования предвыделений в феррито-мартенситных и аустенитных сталях при радиационном воздействии



5

Кооперация проектов



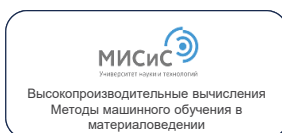
Направления исследований



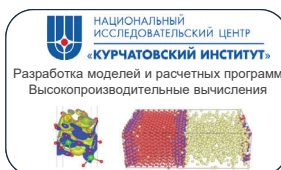
Разработка моделей и расчетных программ
Высокопроизводительные вычисления
Методы машинного обучения в
материаловедении



База данных
по свойствам материалов



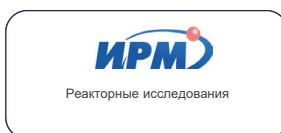
Высокопроизводительные вычисления
Методы машинного обучения в
материаловедении



Разработка моделей и расчетных программ
Высокопроизводительные вычисления



Методы машинного обучения в
материаловедении



Реакторные исследования

Реализуемые проекты

- 1) Разработка, верификация модели и прогноз распухания сплавов: феррито-мартенситных сталей применительно к ЭК181, ЧС139 и аустенитных сталей применительно к ЭК164, ЧС68 (ФГУП «ВНИИА»)
- 2) Разработка, верификация многомасштабной модели и прогноз фазовой стабильности и образования предвыделений в сплавах для проектов Прорыв/ВВЭР: корпусной стали ВВЭР и материалов ВКУ, феррито-мартенситных сталей применительно к ЭК181, ЧС139, аустенитных, применительно к ЭК164, ЧС68 (ФГУП «ВНИИА»)
- 3) Разработка вычислительных инструментов для поиска материалов (легирование, микроструктура) с заданными свойствами на основе информатики материалов основе имеющихся экспериментальных баз данных (ФГУП «ВНИИА»)
- 4) Разработка физических моделей и программного кода для моделирования скорости коррозии оболочек ТВЭЛ в водно-паровой среде для сталей и сплавов проектов ВВЭР-ТОИ, ВВЭР-С, ВВЭР-СКД (НИЦ КИ)
- 5) Разработка программного кода расчета термодинамики аустенитных и феррито-мартенситных сталей, учитывающего сегрегацию элементов на границах зерен и межфазных границах. Разработка прототипа программного кода для расчетов процесса язвенной коррозии в феррито-мартенситных сталях на основе созданной физико-математической модели (НИЦ КИ)
- 6) Создание базы данных по свойствам материалов (ОИВТ РАН)
- 7) Разработка физических моделей, алгоритмов расчёта для определения скорости радиационной ползучести элементов конструкций ядерных реакторов на быстрых нейтронах и проведение послереакторных исследований по определению величины деформации ползучести (АО «ИРМ»)

Направления развития компьютерного материаловедения в Госкорпорации «Росатом»



- Создание цифрового двойника ускоренных вне реакторных и реакторных испытаний кандидатных материалов;
- Разработка физических моделей и алгоритмов расчёта скорости радиационной ползучести элементов конструкций ядерных реакторов на быстрых нейтронах и проведение послереакторных исследований по определению величины деформации ползучести;
- Создание цифровой системы управления качеством и экономическими показателями при производстве ответственных изделий, в том числе энергетического и атомного машиностроения;
- Разработка базы данных свойств материалов, полученных по технологии селективного лазерного плавления;
- Разработка новых функциональных ориентированных 2D и 3D полимерных композиционных материалов, в том числе с использованием графена и его аналогов и методов их получения с использованием аддитивных технологий;
- Разработка системы неразрушающего контроля качества изделий, выполненных с использованием аддитивных технологий;
- Разработка технологии создания биосовместимых углеродных материалов с регулярной пористой структурой для использования в качестве матриц при замещении дефектов костной ткани;
- Создание отечественной системы цифровых двойников технологических процессов производства ПАН прекурсора и УВ
- Разработка отечественной базы данных расчётных механических, эксплуатационных, экономических характеристик ПКМ, математических моделей материалов, методологии оценки свойств материалов на этапах квалификации и серийного производства
- Разработка научно-прикладных основ технологического проектирования процессов изготовления конструкций с высокой степенью интегральности

10

Выводы



- Создана кооперация из ведущих отраслевых и академических организаций, вузов для решения ключевых задач в области реакторного материаловедения
- Достигнуто тесное взаимодействие с экспериментальными исследованиями и отраслевыми заказчиками с целью наиболее эффективного использования результатов проекта
- Разработанные методы моделирования, базы данных, созданная инфраструктура, опыт исследователей может быть успешно использован для решения других задач в области компьютерного материаловедения

11

ЦИФРОВОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

**Опыт МГТУ им. Н.Э. Баумана в моделировании и создании новых
конструкционных и функциональных материалов с заданными свойствами**

Директор МИЦ «Композиты России»
В.А. Нелюб

МГТУ им. Н.Э. Баумана
2020

Мир

- **Разработка** рекордных и «умных» материалов
- **Переход** к управлению **жизненными циклами** материалов

Россия

- **Критические технологии** мирового уровня для базовых отраслей промышленности («Зеленая химия», цифровое материаловедение, супер конструкционные композиты, технологии переработки композитов и др.)
- Стратегическая **безопасность** страны /Развитие **экспортного потенциала** российской промышленности
- **Подготовка** молодых **исследователей и разработчиков**, повышение квалификации в области конструкционных и функциональных материалов на основе новых образовательных технологий (online, VR, AR, цифровые лаборатории, производственные двойники)

**Цифровое
материаловедение**

Зачем



Какие нужны материалы и технологии

РАН, Росатом, Ростех, ВИАМ, МГУ им. М.В. Ломоносова, МГТУ им. Н.Э. Баумана, РХТУ им. Д.И. Менделеева, МГСУ, Сколтех:
Наноматериалы, материалы для аддитивных технологий, композиционные материалы, супертермостойкие (керамика), металлокомпозиты

MIT:

Зеленая химия, гибридные, материалы с памятью формы, супертермостойкие, самовосстанавливающиеся, адаптивные, биоразлагаемые, композиционные материалы

Cambridge:

Зеленая химия, оксидные, металлокомпозиты суперконструкционные, циркониевые, биоразлагаемые, супергидрофобные, биосовместимые, пеностекла, композиционные

Oxford:

Супертермостойкие (карбид кремния), арамидные пластики, изоляционные, алюминиевые, адаптивные, суперконструкционные, полиэфирные материалы, супергидрофобные, композиционные материалы

Перспективные направления 2020-2030

Рекордные материалы и технологии нового поколения:

Супертермостойкие (карбид кремния, керамика, УУКМ), супергидрофобные (перфторированные углеводороды), суперконструкционные (углеродонаполненные материалы на основе новых связующих ПЭЭК, бисмалеимидные и др.), металлокомпозиты, композиционные (углепластики, стеклопластики и др.), наноматериалы.

Умные материалы: самовосстанавливающиеся (полиуретаны и эпоксиды), адаптивные (дилатантные и др.), биосовместимые (углеродные и др), биоразлагаемые (ПЭТФ с алифатическими сомономерами), «зеленая химия» (фурфуроловые связующие и др.).

С точки зрения технологий: цифровизация, искусственный интеллект, «зеленые» и энергоэффективные.

3

Перспективные материалы и конструкции



Адаптивные
Бронезащита



Супертермостойкие
Раструб ракеты



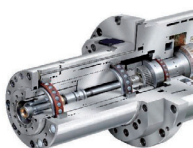
Зеленая химия
Экоматериалы строительства



Биосовместимые
Протезы



Металлокомпозиты
Корпус гиперзвукового самолета



Суперконструкционные
Высоконагруженные механизмы машиностроения



Супергидрофобные
Подводные роботы



Биоразлагаемые
Ёмкость хранения различных сред



Самовосстанавливающиеся
Кузов/монокок автомобилей



Композиционные
Корпуса ракет

4

Барьеры



Недостаточный **уровень цифрового моделирования** с применением суперкомпьютеров на базе искусственного интеллекта



Нехватка **компетенций** мирового уровня в области химии, механики веществ на нано-мезоуровне и т.п.



Нехватка уникального **научно-технологического оборудования** и площадей



Низкий **уровень автоматизации и роботизации** производственных технологий



Недостаточный **охват** фундаментальных **исследований**



Отсутствие **понимания** нужд промышленности на горизонте стратегического планирования

5

Композиты в МГТУ им. Н.Э. Баумана

Оборудование

Имеющееся оборудование на сумму – **0,6 млрд Р**

Площади

Общая площадь – **3 460 м²**
(Без учета площадей: Мосбазальт, Технопарк «Инжинириум», территорий Мытищинского Филиала, РК-5, ЛТ-9 и НОЦ Симплекс)
Энергетика – **0,9 МВт**

Центр МИЦ «Композиты России» - 1140 м² Кафедра МТ-8 «Материаловедение» - 800 м²

Кафедра СМ-12 «Технологии ракетно-космического машиностроения» - 500 м²

Кафедра СМ-13 «Ракетно-космические композитные конструкции» – 270 м²

Кафедра ФН-5 «Фундаментальные науки» - 450 м²

Лаборатория СМ1-8 НИИСМ – 300 м²

Материалы и технологии

ПКМ и технологии их переработки, биосовместимые материалы (сорбенты), самовосстанавливающиеся материалы, металлокомпозиты, аддитивные технологии



6

Композиты в МГТУ им. Н.Э. Баумана:

Наука

	2010-2020	2020-2030
Научные сотрудники и ИТР, чел.	105	297
Российские и зарубежные ведущие ученые, чел.	18	54
Количество публикаций в изданиях I и II квартилей, ед.	>50	>350
Проекты РФФИ и РНФ, ед.	>20	>49
Проекты МИНОБРНАУКИ и МИНПРОМТОРГ, ед.	>50	>70
Количество созданных МИП и стартапов, ед.	4	11
Созданные инновационные производства, ед.	1	4
Количество РИД, ед.	>100	>210
Коммерциализация РИД, млн Р	>500	>1 400
Количество внедренных технологий, ед.	>50	>140
Объем оказанных услуг, млн Р	6 400	18 000

Цель: создать научную школу в области цифрового материаловедения

7

Заказчики и партнеры

15
компаний с государственным участием

50
индустриальных партнеров

10
институтов РАН

20
иностранных партнеров



8

Композиты в МГТУ им. Н.Э. Баумана: Образование



2010-2020



2020-2030

Штатные сотрудники, чел.	>200	>350
Привлеченные иностранные специалисты, чел.	>15	>100
Численность иностранных магистрантов и аспирантов, чел.	10	>70
Количество разработанных и внедренных on-line курсов, ед.	2	>70
Количество международных стажировок, ед.	>10	>35
Подготовленные молодые исследователи и разработчики, чел.	>800	>1400
Количество проведенных мероприятий, направленных на популяризацию направления, ед.	30	>70
Курсы на английском языке, ед.	5	>35

Цель: создать высшую инженерную школу цифрового материаловедения

9

Образование в МИЦ «Композиты России»

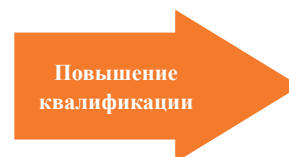
Полный жизненный цикл подготовки специалиста



- Дополнительные баллы к ЕГЭ
- Взаимодействие с профильными школами: ИТ классы, Инженерные классы, Академические классы
- Повышение квалификации педагогов московских школ
- Конкурсы и соревнования: Junior World Skills, Олимпиада НТИ



- Магистратура
- Аспирантура
- Лабораторные работы МТ-8 и СМ-13
- Умник
- Конкурсы и соревнования: Composite Battle World Cup, World Skills, Я-профессионал
- Выставки и конференции: Композит-Экспо, Композиты без границ, JEC World и др



- Дополнительное образование
- Повышение квалификации

10

Развитие материалов в МГТУ им.Н.Э.Баумана Взаимодействие



11

Проекты

Ремонтные бандажи для действующих нефтепроводов,
в том числе в условиях Арктического региона



12

Ядро APM Structure3D



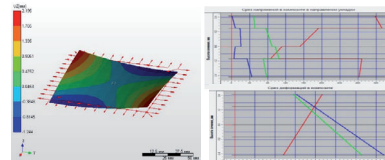
Опция Composite

- **APM WinMachine**
Машиностроительные конструкции и оборудование
- **APM StructFEM**
Крупные составные изделия и структуры
- **APM Civil Engineering**
Строительные конструкции с учетом СНиП
- **APM MultiPhysics**
Связанные задачи

- Свойства материала по классической теории;
- Ортотропная или анизотропная модель;
- Произвольная схема армирования
- Учет адгезии между матрицей и волокном

Выполнение расчета

- Пост-обработка
Результаты для всего пакета либо отдельных слоев



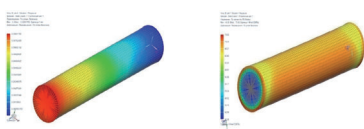
- Расчет запасов по различным критериям прочности

Планируемая опция: модуль автоматизированного принятия решений для конструктора и технолога Инженерное промышленное ПО, для конструкторов, технологов и других участников производственно– технологических цепочек получения композиционных материалов и изделий на их основе с прогнозируемыми свойствами на базе «цифровых двойников», алгоритмов искусственного интеллекта и систем поддержки принятия решений

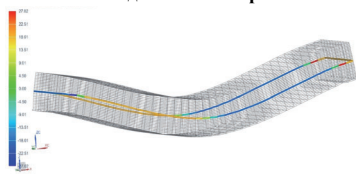
13

Примеры численного моделирования при решении частных задач

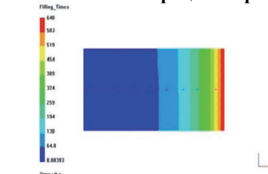
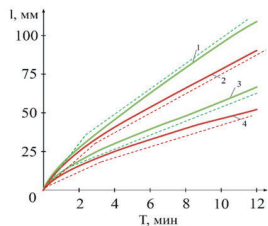
Расчет напряжений и перемещений



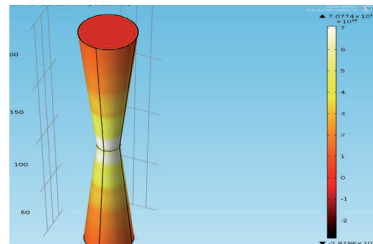
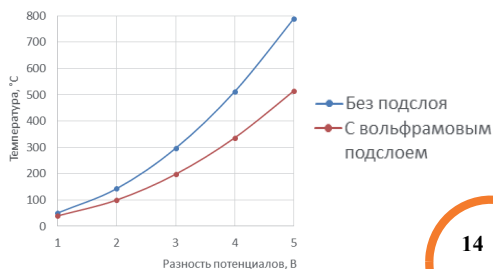
Расчет сдвиговых напряжений



Расчет кинетики процесса пропитки



Расчет температур

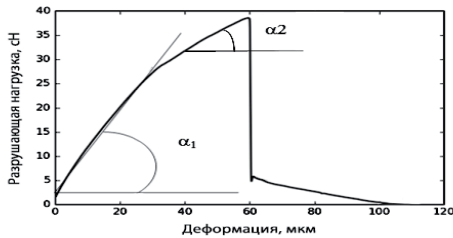


14

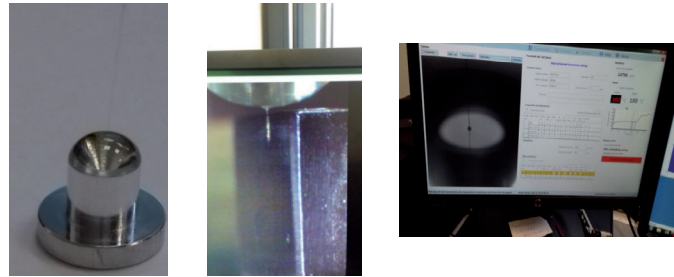
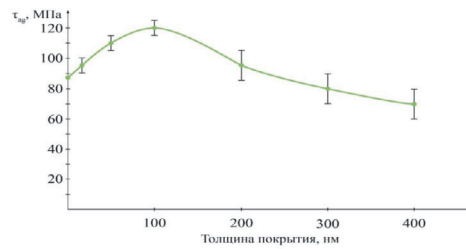
Марки нержавеющей стали, используемые в качестве материала покрытия	Напряжения, МПа	Перемещения, %
12X18H10T	506,67	0,208
AISI 410 (12X13)	523,02	0,206
AISISteel 1005	508,23	0,208

Примеры определения адгезионной прочности методом pull-out

Материал покрытия	Адгезионная прочность, МПа
Без покрытия	87±8
Титан	83±5
Сталь	112±5
Медь	110±5



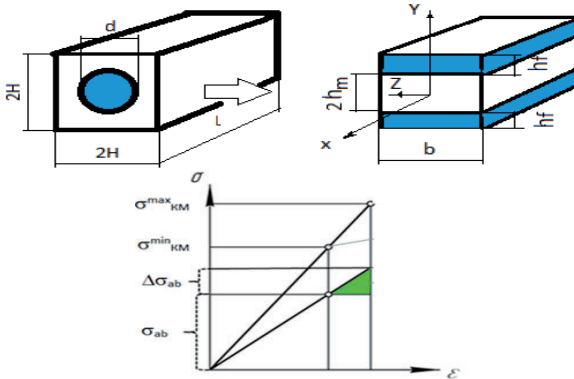
$$E_c = E_f \varphi + E_m (1 - \varphi) + \frac{A_{mf}}{H}$$



Зависимость адгезионной прочности УВ с покрытием из стали – эпоксидная матрица от толщины покрытия

15

Модели волокнистого композита, учитывающие адгезионное взаимодействие



Составляющие толщины межфазного слоя

$$h_m = \frac{1}{E_m} \frac{E_f h_f E_m h_m}{(E_m h_m + E_f h_f + A_{mf})}$$

$$h_f = \frac{1}{E_f} \frac{E_f h_f E_m h_m}{(E_m h_m + E_f h_f + A_{mf})}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} p_c \frac{E_m}{[E_m(1-\varphi) + E_f \varphi + \frac{A_{mf}}{(h_m + h_f)}]} \leq \sigma_{mb} \quad \text{условие прочности матрицы на растяжение} \\ 2 \frac{h_m}{l} p_c \frac{|(E_m - E_f)\varphi - \frac{A_{mf}}{(h_m + h_f)}|}{[E_m(1-\varphi) + E_f \varphi + \frac{A_{mf}}{(h_m + h_f)}]} \leq \tau_{mb} \quad \text{условие прочности матрицы на сдвиг} \\ p_c \frac{E_f}{[E_m(1-\varphi) + E_f \varphi + \frac{A_{mf}}{(h_m + h_f)}]} \leq \sigma_{fb} \quad \text{условие прочности волокна на растяжение} \\ 2 \frac{h_f}{l} p_c \frac{|(E_m - E_f)(1-\varphi) + \frac{A_{mf}}{(h_m + h_f)}|}{[E_m(1-\varphi) + E_f \varphi + \frac{A_{mf}}{(h_m + h_f)}]} \leq \tau_{fb} \end{array} \right.$$

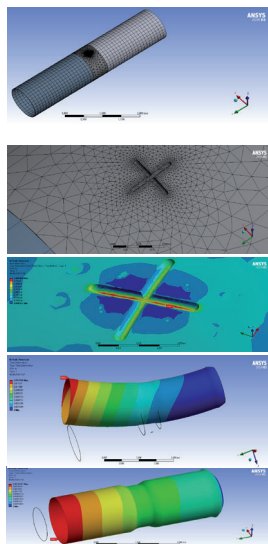
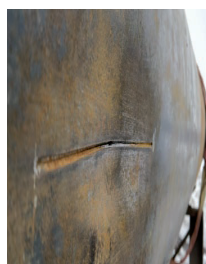
$$p_c \frac{\frac{A_{mf}}{(h_m + h_f)}}{[E_m(1-\varphi) + E_f \varphi + \frac{A_{mf}}{(h_m + h_f)}]} \leq \sigma_{ab}$$

условие прочности адгезионного взаимодействия волокно-матрица

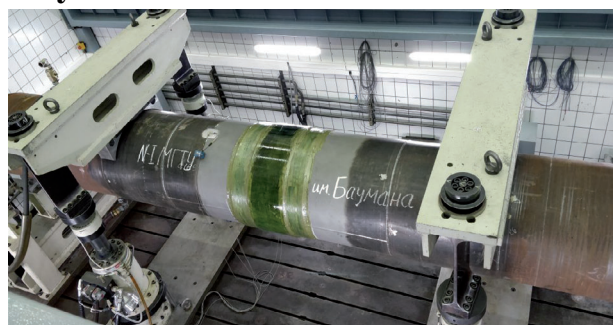


16

Расчет и внедрение ремонтных бандажей из углепластиков

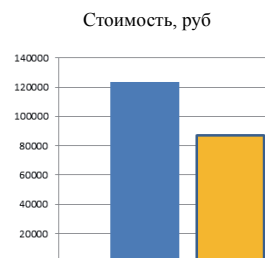


Без покрытия
С покрытием из меди



Варьируемые параметры:

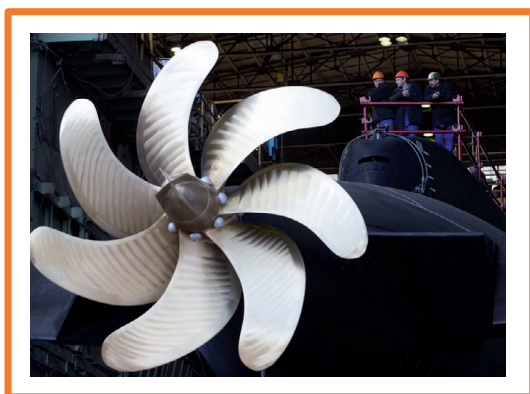
- материал и габариты трубы;
- нагрузки (давление и изгибающий момент);
- температура рабочих сред.



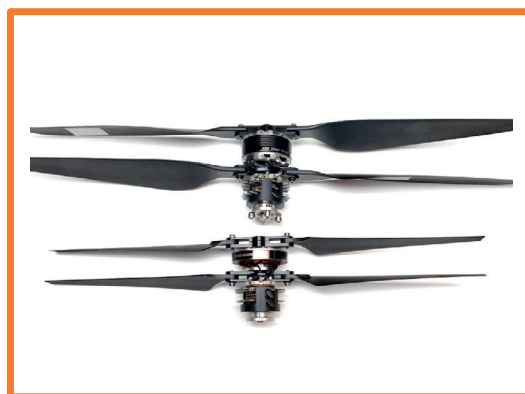
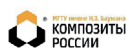
17

Проекты

Гребной вал



Композитные лопасти и винты для беспилотных летательных аппаратов

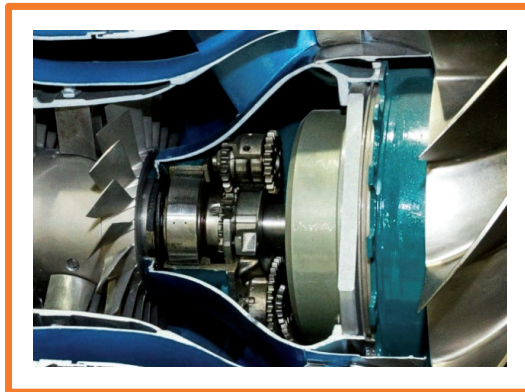


18

Пространственные размеростабильные конструкции для космических аппаратов



Первая ступень вентиляторной лопасти для турбин, в т.ч. для БПЛА «Дань-М»



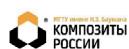
19

Проекты

Надстройка
для пассажирского судна



Планер беспилотного
летательного аппарата



Железнодорожная аппарель для съезда
тяжелой техники



Мобильные дорожные покрытия



20



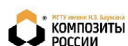
Стабилизатор



Сверхлегкие композитные баллоны
высокого давления



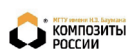
21



22

Проекты

Индустриальный экзоскелет

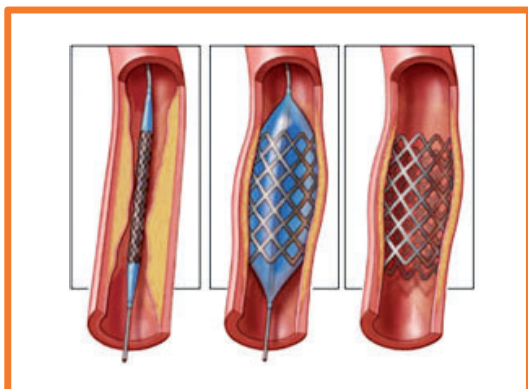


Корпусные элементы манипуляторов, в том числе и роботов



23

Венозный клапан из полимерного материала



Баллистические шлемы



24

Облегчение АК Ствол, крышка ствольной коробки, цевье



Бронежилеты, в т.ч. из сверхвысокомолекулярного полиэтилена



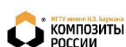
25

Проекты

**Химически стойкие
емкости и трубы**

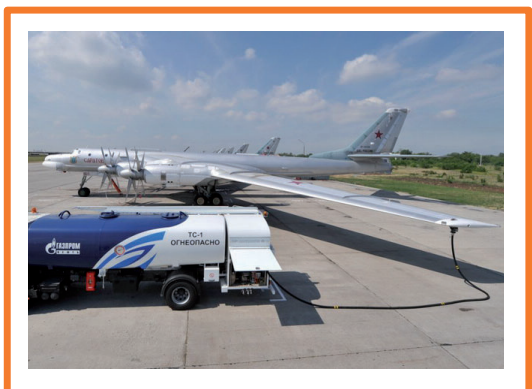


**Самозатягивающиеся
композитные баки**



26

**Шланги для авиационных
заправщиков топливом**



**Композитные трубы для трудноизвлекаемых
запасов нефти**

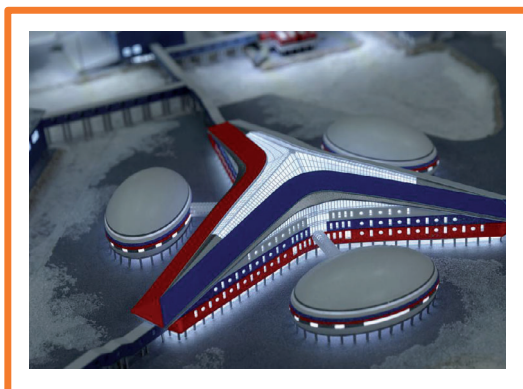


27

**Типовые строительные конструкции
из наномодифицированных композиционных
материалов**



**Обогрев инфраструктуры Арктики
с помощью саморегулирующихся кабелей**



28

Проекты

Трубопроводная арматура
из композиционных материалов



Непрерывное базальтовое волокно
повышенной линейной плотности
и продукты его переработки



29

Проекты

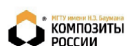
Отечественное инженерное ПО
ГИПК СУ ПЖЦ



30

Проекты

Базальтовая сетка завода «МОСБАЗАЛЪТ»



31

СОДЕРЖАНИЕ

Состав Научного совета РАН по материалам и наноматериалам	2
Положение о Научном совете РАН по материалам и наноматериалам	5
Работа Научного совета РАН по материалам и наноматериалам в 2020 г. . . .	9
Результаты, полученные в 2019 г. по направлению работы Научного совета РАН по материалам и наноматериалам	31
Приложения	67