

Аннотация

доклада научного сотрудника лаборатории физико-химической инженерии композиционных материалов Химико-технологического отдела ФИЦ ПХФ и МХ РАН к.ф.-м.н Максименко Вячеслава Николаевича, представляемого на 28-й конкурс молодых ученых на соискание премии С. М. Батурина.

Название доклада: Атомистическое моделирование диффузионно-контролируемых процессов в жаропрочных сплавах

В современном материаловедении актуальным является переход от эмпирического поиска к целенаправленному конструированию материалов с заранее заданными свойствами. Этот переход требует развития адекватных инструментов моделирования с созданием цифровых двойников материалов и процессов, способных описывать и прогнозировать поведение реальных материалов в широком диапазоне пространственных и временных масштабов, в том числе недоступных для физического эксперимента. В качестве одного из таких инструментов выступает многоуровневое компьютерное моделирование, в частности атомистическое моделирование методом молекулярной динамики, точность которого главным образом (и даже критически) зависит от корректности используемых межатомных потенциалов.

В рамках развития методов атомистического моделирования для проводимых в лаборатории ФХИМ ХТО ФИЦ ПХФ и МХ РАН (зав. лаб. - проф. Колобов Ю. Р.) исследований сплавов на основе ОЦК тугоплавких металлов (в рамках темкарты под научным руководством НИР академика С.М. Алдошина) и жаростойких фехралей, используемых в качестве матриц в установках некаталитической конверсии углеродных газов (в рамках темкарты под научным руководством НИР зав. отделом к.х.н. И.В. Седова), а также в рамках хозяйственных работ с АО «Композит» (головной материаловедческой научно-исследовательской организацией Госкорпорации «Роскосмос») были разработаны и апробированы межатомные потенциалы чистых металлов Cr, Mo, W, Cu и сплавов систем Cr-Ta-V-W и W-Cu в рамках N-частичного подхода. Потенциалы воспроизводят основные свойства чистых металлов и сплавов, что подтверждено согласием их прогнозов с экспериментальными данными, а также с расчётами из первых принципов, в том числе для случая многокомпонентных сплавов VNbMoTaW и VCrNbMoTaW. Основные результаты работы опубликованы в статьях [1-8]. Успешное завершение хозяйственных работ с АО «Композит», а также высокая оценка со стороны заказчика проведенной научно-исследовательской работы, способствовали продолжению сотрудничества между ФИЦ ПХФ и МХ РАН и АО «Композит».

Полученные результаты позволили сформулировать научные основы для дальнейших исследований с использованием методов атомистического моделирования диффузионных потоков атомов примеси по границам зерен, в частности в жаропрочном псевдосплаве W-Cu, характеризующимся взаимно-нерастворимыми компонентами. Использование надежных межатомных потенциалов, разработанных для моделирования диффузионных процессов, позволяет получать корректные прогнозы диффузии атомов примесей по дефектам кристаллической структуры (главными из которых являются границы зерен) и формирует основу для целенаправленного проектирования с помощью компьютерного моделирования новых сплавов и композиционных материалов (псевдосплавов), устойчивых к радиационному повреждению и высокотемпературному окислению, используемых в качестве материала для проволочных матриц в установках для некаталитической (матричной) конверсии углеродных газов [8].

1. Maksimenko V. N. et al. N-body interatomic potential for molecular dynamics simulations of V-Cr-Nb-Mo-Ta-W system //Computational Materials Science. – 2025. – Т. 247. – С. 113533. DOI: 10.1016/j.commatsci.113533. (Q1).
2. Lipnitskii A. G., Maksimenko V. N. et al. A new method of calculation of the thermodynamic properties of point defects in concentrated solid solutions: An application to VNbMoTaW alloy //Computational Materials Science. – 2025. – Т. 256. – С. 113945. DOI: 10.1016/j.commatsci.113945. (Q1).
3. Nelasov I.V., Manokhin S.S., Kolobov Yu.R., Maksimenko V.N., Kondratiev D.M., Gusakov M.S., Beresnev A.G. Computer simulation and experimental study of W-Ta particle separation in a chromium-based alloy //Letters on Materials. – 2024. – Т. 14. – №. 4. – С. 460-467. DOI: 10.48612/letters/2024-4-460-467. (Y1).
4. Poletaev D.O., Lipnitskii A.G., Maksimenko V.N., Kolobov Yu.R., Beresnev A.G., Gusakov M.S.. The N-body interatomic potentials for molecular dynamics simulations of diffusion in C15 Cr₂Ta Laves phase //Computational Materials Science. – 2023. – Т. 216. – С. 111841. DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111841. (Q1).
5. Vyazmin A.V., Lipnitskii A.G., Maksimenko V.N., Poletaev D.O., Kartamyshev A.I. Molecular dynamics simulation of diffusion along general high-angle grain boundaries in copper and vanadium //Letters on Materials. – 2023. – Т. 13. – №. 4s. – С. 450-455. DOI: 10.22226/2410-3535-2023-4-450-455. (Y1).
6. Kartamyshev A.I., Lipnitskii A.G., Maksimenko V.N., Vyazmin A.V., Nelasov I.V., Poletaev D.O. N-body potential for simulating lattice defects and diffusion in copper //Computational Materials Science. – 2023. – Т. 228. – С. 112284. DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112284. (Q1).
7. Vyazmin A.V., Lipnitskii A.G., Maksimenko V.N., Poletaev D.O., Kartamyshev A.I. Molecular dynamics simulation of diffusion along general

- high-angle grain boundaries in copper and vanadium //Letters on Materials. – 2023. – Т. 13. – №. 4s. – С. 450-455. DOI: 10.22226/2410-3535-2023-4-450-455. (Y1).
8. Maksimenko V. N. et al. The N-body interatomic potential for molecular dynamics simulations of diffusion in tungsten //Computational Materials Science. – 2022. – Т. 202. – С. 110962. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110962. (Q1).
9. Манохин С.С, Колобов Ю.Р., Максименко В.Н., Токмачева-Колобова А.Ю., Фокин И.Г., Отнелъченко В.В., Седов И.В. Исследование эволюции структурно-фазового состояния сплава Fe-Cr-Ni(X), в том числе с модифицированной поверхностью, при работе в качестве проволочного материала матрицы в процессе высокотемпературной конверсии углеводородных газов //Физика и химия обработки материалов. – 2026. – №. 1. – С. 43-53. (Y1).