

ИНСТИТУТ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ ДВО РАН

Важнейшие результаты исследований

1) Перовскит YFeO_3 является перспективным материалом для использования в качестве катализатора окисления сажистого углерода. Экспериментально установлено, что процесс каталитического горения углерода в его присутствии лимитирован диффузией кислородных вакансий в структуре катализатора. Методом теории функционала плотности исследован процесс миграции кислородных вакансий из объема кристалла YFeO_3 на его поверхность в направлении (100). В исследуемом перовските на поверхности и объеме кристалла можно выделить 2 основных типа кислородных вакансий (O1 и O2). Рассмотрены все возможные пути выхода вакансий на поверхность и определены энергетические барьеры для этих переходов (рис. 1а). Барьеры диффузии для перемещения вакансии в объеме кристалла для путей O1-O1, O1-O2 и O2-O2 составили 1.02, 1.1 и 2.2 эВ (Рис. 1б), соответственно. В виду высокого барьера прямого пути O2-O2 миграция вакансии из положения O2 в O2 будет проходить по пути O2-O1-O2. Выход вакансии на поверхность в положение O2(s) имеет энергетический барьер порядка 1 эВ, величина барьера для положения O1(s) в три раза выше. Полученные данные объясняют механизм миграции решеточного кислорода в каталитических процессах и в ионных проводниках на основе YFeO_3 . (ХФИЦ ИМ ДВО РАН)

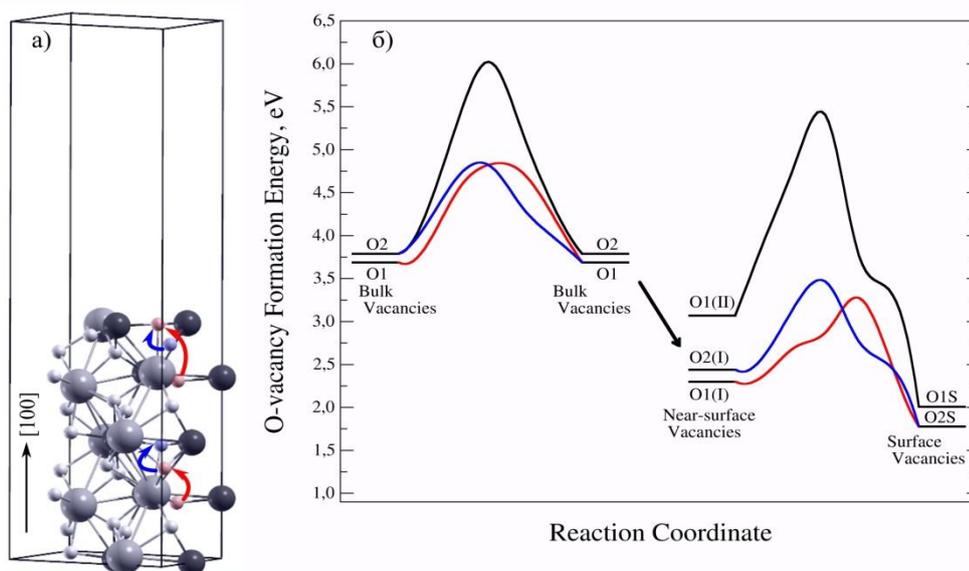


Рис. 1. (а) Пути миграции кислородных вакансий в кристалле $\text{YFeO}_3(100)$, (б) энергетические барьеры движения кислородных вакансий в объеме и в направлении поверхности; стрелками обозначены пути движения вакансий, соответствующие переходам O1→O1, O2→O1, O2(I)→O2S и O1(I)→O2S.

Gnidenko A. A., Chigrin P. G. Lattice oxygen diffusion in $\text{YFeO}_{3-\delta}$ perovskite: DFT study // *Computational Condensed Matter*. – 2022. – С. e00767. DOI: 10.1016/j.cocom.2022.e00767.
Gnidenko A. A., Chigrin P. G. Atomic and electronic structure of YFeO_3 surface with oxygen vacancies // *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 15 (3.1) (2022) 65–70. DOI: 10.18721/JPM.153.111

2) Сталь AISI 304 является наиболее востребованной нержавеющей сталью. Однако, из-за низкой твердости она сильно подвержена абразивному изнашиванию. Нанесение металлокерамических покрытий может улучшить ее трибологическое поведение и сопротивляемость коррозии. Впервые были приготовлены металлокерамические Fe-Cr-V

покрытия на нержавеющей стали AISI304 путем ее электроискровой обработки в смеси железных гранул и 5, 10 и 15 об.% порошка CrB₂. Данные рентгенофазового анализа покрытий указывают на структуру металлокерамического композита, где роль связки выполняет феррохром, а функцию керамики – фазы Cr₅B₃, Cr₂B и Fe₂₃B₆ (рис. 2 а). Бориды формировались в результате полной деструкции CrB₂ при его взаимодействии с расплавом железа в условиях электрического разряда. С ростом концентрации CrB₂ в анодной смеси наблюдалось улучшение антикоррозионных свойств Fe-Cr-B покрытий в 3,5% растворе NaCl (рис. 2 б) и повышение жаростойкости по сравнению со сталью AISI304 от 5 до 15 раз (рис. 2 в). Применение электроискровых Fe-Cr-B покрытий на нержавеющей стали AISI304 позволяет повысить твердость ее поверхности, снизить и стабилизировать коэффициент трения, а также улучшить износостойкость в 3,7 раза (рис. 2 г). (ХФИЦ ИМ ДВО РАН)

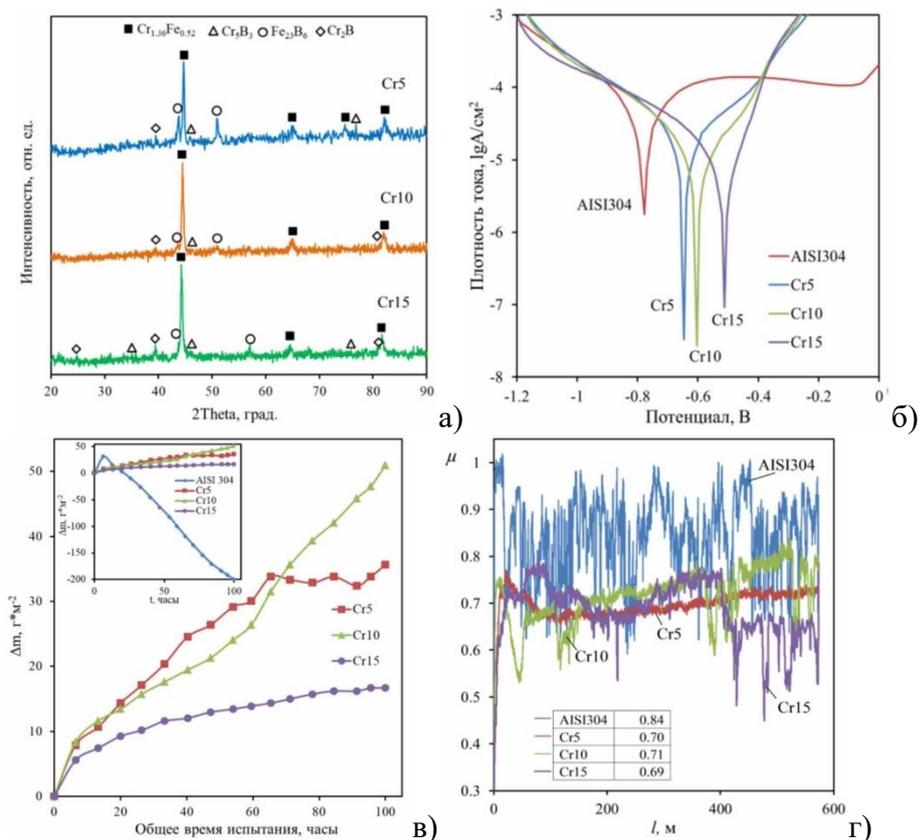


Рис. 2: а – рентгеновские дифрактограммы покрытий; б – поляризационные спектры; в – жаростойкость образцов с покрытиями при температуре 900 °С по сравнению со сталью AISI304; г – динамика коэффициента трения покрытий в процессе изнашивания при нагрузке 25 Н.

Бурков А.А., Кулик М.А., Беля А.В., Крутикова В.О. Электроискровое осаждение порошка дихорида хрома на нержавеющую сталь AISI 304. Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты). 2022. Т. 24. № 2. С. 78-90. А.А. Бурков, М.А. Кулик, А.В. Беля. Электроискровое осаждение порошка дихорида хрома на нержавеющую сталь AISI304 нелокализованным анодом. Сборник докладов II Всероссийской научно-практической конференции с международным участием «Фундаментальные проблемы и прикладные аспекты химической науки и образования» г. Махачкала, 2022 г.