

ИНСТИТУТ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ ДВО РАН

Основные научные результаты исследований в 2024 году

1) Впервые методами теории функционала плотности изучен механизм миграции интеркалированного кислорода в перовските YCrO_3 . Движение атомов кислорода осуществляется с активационным барьером порядка 0,5 эВ (рисунок 1, а), что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Наличие междоузельного атома кислорода приводит к изменению степени окисления двух соседних атомов хрома. Связывающая молекулярная орбиталь образуется за счет перекрывания d_{xy} орбиталей атомов хрома и p орбиталей атомов кислорода, являющимися мостиковыми лигандами (рисунок 1, б). В основе окислительно-восстановительного процесса лежит разрыв связи между мостиковым междоузельным атомом кислорода и одним из атомов хрома в степени окисления 4+, с дальнейшим образованием новой химической связи с атомом хрома в степени окисления 3+. Движение атома кислорода вызывает повышение энергии уровня связывающей орбитали до t_{2g} уровня атома Cr^{3+} в направлении которого происходит миграция. Величина смещения данного уровня соответствует активационному барьеру миграции (рисунок 1, в). Таким образом, описанный окислительно-восстановительный процесс является лимитирующей стадией миграции междоузельного атома кислорода. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании ионных проводников и катализаторов. ИМ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН.

Руководитель с.н.с., к.ф.-м.н. Гниденко А.А. Авторы: Гниденко А.А., Чигрин П.Г

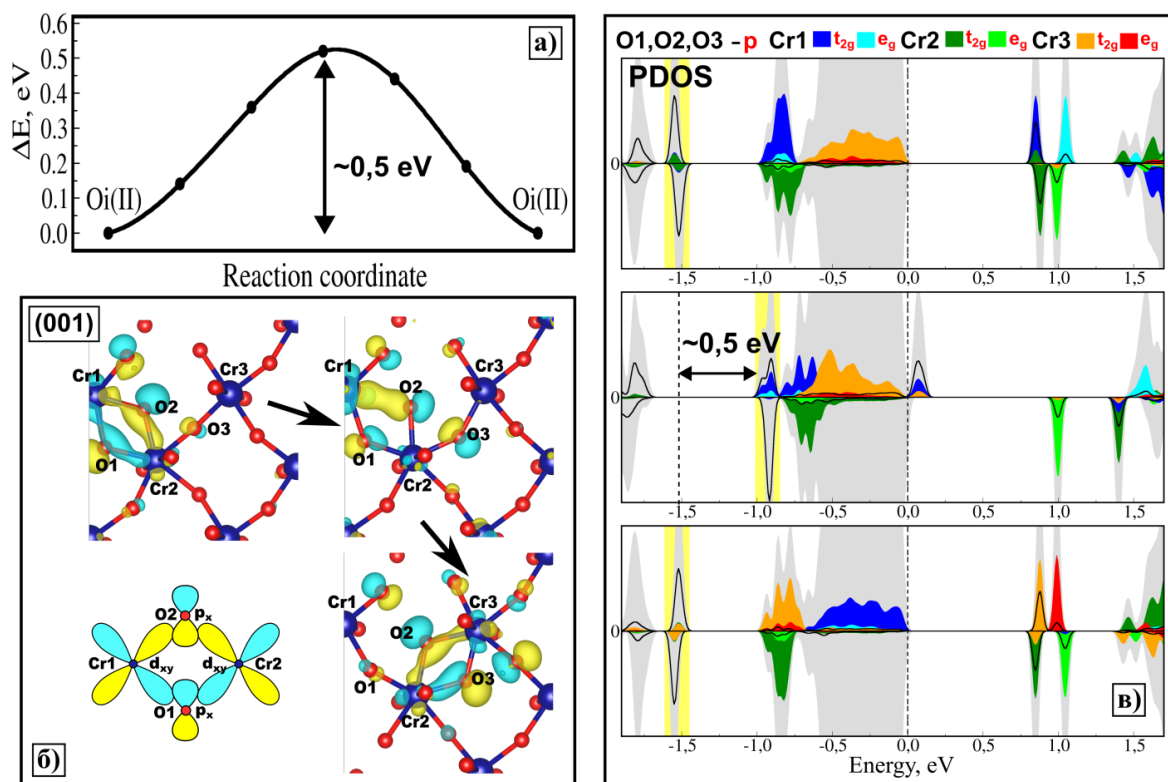


Рисунок 1 – Миграция междоузельного кислорода в структуре YCrO_3 : а) энергетический барьер миграции междоузельного кислорода в структуре YCrO_3 ; б) изменение связывающих молекулярных орбиталей мигрирующего интеркалированного атома кислорода; в) соответствующие изменения в парциальных плотностях электронных состояний (полосы, соответствующие связывающим молекулярным орбиталям, выделены желтым цветом)

2) Впервые получены металлокерамические покрытия Fe-TaC на нержавеющей стали AISI304. Покрытия получены методом электроискрового легирования с использованием нелокализованного электрода (НЭ), состоящего из железных гранул и порошка карбида тантала (рисунок 2, а). Присутствие частиц порошка TaC способствовало возникновению электрических разрядов и поэтому скорость осаждения материала на подложку увеличивалась с ростом его концентрации в НЭ (рисунок 2, б). Рентгеноструктурный анализ нанесенных покрытий показывает наличие фаз TaC, γ Fe и α Fe (рисунок 2, в). Концентрация карбида тантала повышалась от 68,9 до 97,1 об.% с ростом содержания порошка TaC в НЭ от 2,4 до 14,8 об.%. Зависимость скорости износа покрытий от концентрации TaC в анодной смеси имела вид параболы с минимумом 5 об.%. При увеличении концентрации TaC в НЭ выше 5 об.% скорость износа покрытий монотонно увеличивалась из-за усугубляющегося выкрашивания зерен TaC, вызванного возрастающим дефицитом металлической связи. Применение разработанных покрытий позволяет сократить износ изделий из стали AISI304 в десятки раз (рисунок 2, г). Полученные результаты могут быть использованы в области теплоэнергетики, машиностроения и химической промышленности. ИМ ДВО РАН – обособленное подразделение ХФИЦ ДВО РАН.

Руководитель: Заведующий лабораторией «Физико-химических основ технологии материалов», с.н.с., к.ф.-м.н., Бурков А.А. Авторы: Бурков А.А., Чигрин П.Г., Кулик М.А.

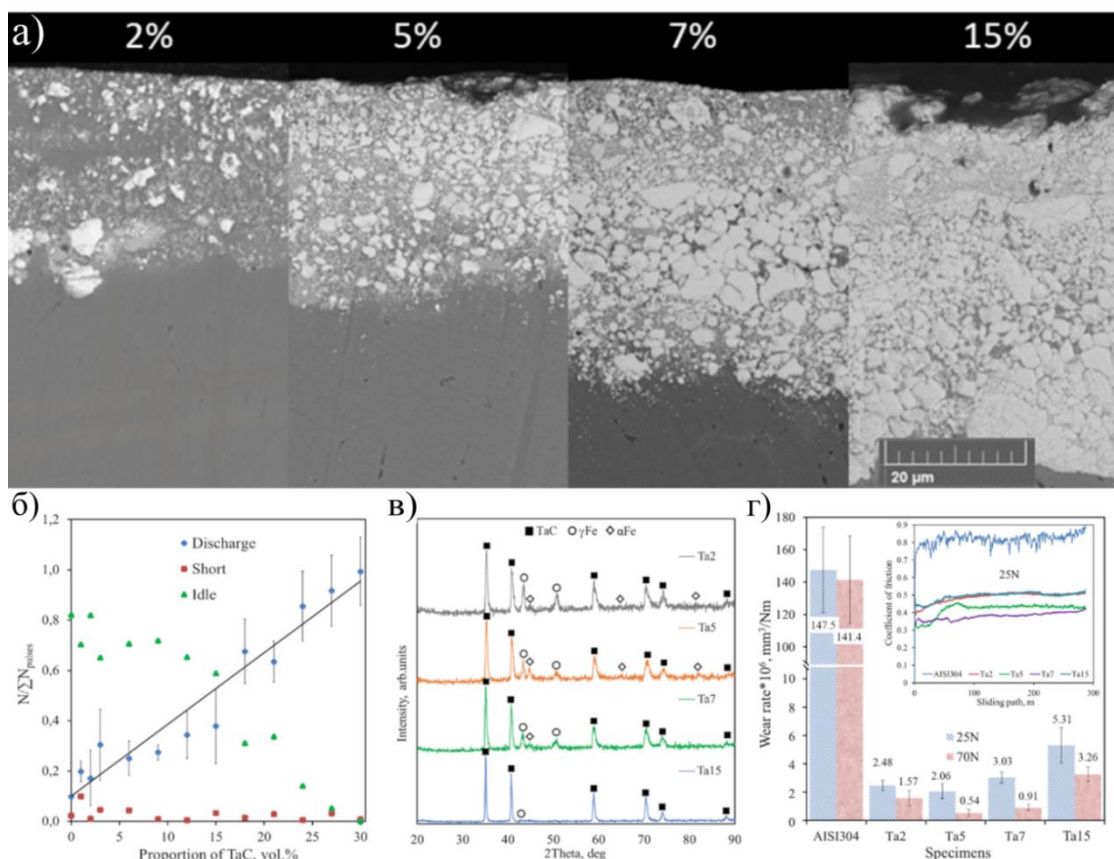


Рисунок 2 – Структура, состав и свойства покрытий: а) СЭМ-изображения поперечного сечения покрытий, б) зависимость соотношения разрядных, холостой и короткозамкнутых импульсов от концентрации карбида тантала в НЭ во время обработки по данным осциллографии, в) результаты рентгенофазового анализа покрытий, г) износ и коэффициент трения Fe-TaC покрытий по сравнению с нержавеющей сталью ISI304

Burkov A.A., Chigrin P.G., Kulik M.A. Effect of TaC content on microstructure and wear behavior of PRMMC Fe-TaC coating manufactured by electrospark deposition on AISI304 stainless steel // Surface and Coatings Technology, 2024. – V. 494. – № 131446. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2024.131446> (Q1, IF=5.3)