



# ОТЧЕТ

## О РАБОТЕ НАУЧНОГО СОВЕТА РАН ПО МАТЕРИАЛАМ И НАНОМАТЕРИАЛАМ

2021 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.

Научный совет РАН по материалам и наноматериалам в новом составе был утвержден постановлением Президиума РАН от 23 сентября 2021 г. № 146.

### **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   |
| 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)   |

- Глазер 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)
- Добаткин С.В. - доктор технических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук (по согласованию)
- Дуб А.В. - доктор технических наук, Акционерное общество «Наука и инновации» Госкорпорации «Росатом» (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)
- 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
- Люлин С.В. - член-корреспондент 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

- Мерзликин А.М. - доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук (по согласованию)
- 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
- Оганов А.Р. - доктор физико-математических наук, Сколковский института науки и технологий (по согласованию)
- Озерин А.Н. - член-корреспондент РАН
- Павленко В.И. - доктор технических наук, Федеральное государственное образовательное учреждение высшего образования "Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова" (по согласованию)
- 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)
- Хаширова С.Ю. - доктор химических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» (по согласованию)
- Хохлов А.Р. - 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, приглашенных 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. рассыпает 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 представлявшими 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 2021 г.

---

В 2021 г. было проведено пять заседаний Научного совета РАН по материалам и наноматериалам (далее – Совета), первое из которых было посвящено теме, начатой в предыдущем году – **посвященных моделированию материалов и их свойств**.

Заседание прошло в режиме он-лайн в связи с эпидемиологической обстановкой 15 марта со следующей повесткой:

1. Вступительное слово председателя Научного совета РАН, академика Сергея Михайловича Алдошина.
2. Сообщение академика Игоря Анатольевича Каляева, председателя Совета по приоритетному направлению Стратегии научно-технологического развития России «Переход к цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших данных, машинного обучения и искусственного интеллекта» «О формировании комплексных научно-технических программ полного инновационного цикла в области новых материалов».
3. Доклад профессора, д.х.н. Владислава Анатольевича Блатова, директора Международного научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению (Самарский государственный технический университет), директора Межвузовского научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению (Самарский национальный исследовательский университет имени акад. С.П. Королева) «О прогнозировании новых материалов с использованием топологических методов».
4. Доклад профессора, д.ф.-м.н. Владимира Ильича Анисимова, руководителя Суперкомпьютерного центра дизайна перспективных материалов Института физики металлов УрО РАН, заведующего лабораторией оптики металлов «Разработка методов компьютерного моделирования материалов с сильными электронными корреляциями».
5. Обсуждение, дискуссия

Сообщение академика **Игоря Анатольевича Каляева**, председателя Совета по приоритетному направлению Стратегии научно-технологического развития России «Переход к цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших данных, машинного обучения и искусственного интеллекта» «О формировании комплексных научно-технических программ полного инновационного цикла в области новых материалов» (презентация приведена в *приложении 1*).



Цель сообщения – проинформировать членов Совета и участников заседания об основных правилах и особенностях формирования научно-технических программ полного инновационного цикла в рамках Стратегии научно-технологического развития России, в

том числе, и области новых материалов. Не секрет, что эффективность разработок в Российской Федерации крайне низкая. Доля продукции России на мировом рынке высоких технологий – менее 1 %. По Индексу глобальной конкурентности мы занимаем 43 место в мире, глобальной инновационности – 45 место в мире. Доля предпринимательского сектора в структуре внутренних расходов на исследования и разработки в настоящее время в России менее 30 %, в то время как в других развитых странах: Германии, Китае, более 60 %.



Рассмотрев динамику внутренних затрат в России на исследования и разработки по источникам финансирования (средства государства, бюджета и средства предпринимательского, промышленного сектора), можно видеть, что с 2000 по 2014 гг. рост вкладываемых средств государства вырос в 2,5 раза, а вклад промышленного сектора снижается, т.е. наблюдается суммарный рост, но использование этих результатов в реальном секторе экономики наоборот снижается. В России крайне низкая патентная активность.

Просматриваются три возможных сценария научно-технологического развития Российской Федерации.

1. Импорт технологий, но, понятно, что в условиях санкций никто эти технологии импортировать в Россию не будет.

2. Научно-технологическое лидерство при традиционной специализации экономики.

3. Научно-технологическое лидерство с ориентацией на новую экономику

Анализ свидетельствует, что именно третий сценарий – научно-технологическое лидерство с ориентацией на новую экономику – позволит достичь определенного эффекта, по сравнению с двумя другими сценариями. Исходя из этого сценария, 1 декабря 2016 г. вышел указ Президента о Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации.

Цель Стратегии – обеспечение независимости и конкурентоспособности страны за счет создания эффективной системы наращивания и наиболее полного использования интеллектуального потенциала науки, а также трансформации науки и технологий в ключевой факторов развития России. Реализация Стратегии была поручена Российской академии наук и с этой целью были сформированы Советы по приоритетам Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации.

Таких Советов создано 7:

1. «Переход к высокопродуктивному и экологически чистому агро- и аквахозяйству, разработка и внедрение рационального применения средств химической и биологической

защиты сельскохозяйственных растений и животных, хранение и эффективная переработка сельскохозяйственной продукции, создание безопасных и качественных, в т.ч. функциональных продуктов питания» (Председатель академик Донник И.М.)

2. «Возможность эффективного ответа российского общества на большие вызовы с учетом взаимодействия человека и природы, человека и технологий, социальных институтов на современном этапе глобального развития, в т.ч. применяя методы гуманитарных и социальных наук» (Председатель академик Дынкин А.А.)

3. «Переход к персонализированной медицине, высокотехнологическому здравоохранению и технологиям здоровьесбережения, в том числе за счет рационального применения лекарственных препаратов, прежде всего антибактериальных» (Председатель академик Макаров А.А.)

4. «Связность территорий РФ за счет создания интеллектуальных транспортных и телекоммуникационных систем, а также занятия и удержания лидерских позиций в создании международных транспортно-логистических систем, освоения и использования космического и воздушного пространства Мирового океана, Арктики и Антарктики» (Председатель академик Погосян М.А.)

4. «Связность территорий РФ за счет создания интеллектуальных транспортных и телекоммуникационных систем, а также занятия и удержания лидерских позиций в создании международных транспортно-логистических систем, освоения и использования космического и воздушного пространства Мирового океана, Арктики и Антарктики» (Председатель академик Погосян М.А.)

5. «Переход к экономически чистой и ресурсо-сберегающей энергетике, повышение эффективности добычи и глубинной переработки углеводородного сырья, формирования новых источников, способов транспортировки и хранения энергии» (Председатель академик Фортов В.Е.)

6. «Противодействие техногенным, биогенным, социокультурным угрозам, терроризму и идеологическому экстремизму, а также киберугрозам и иным источникам опасности для общества, экономики и государства» (Председатель академик Чехонин В.П.)

7. «Переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта» (Председатель академик Каляев И.А.)

обучения и искусственного интеллекта» (Председатель академик Каляев И.А.)

В положении о Советах отмечено, что в его состав должны входить члены РАН, представители ведущих научных центров и ведущих университетов страны, представители крупного бизнеса, представители Федеральных органов исполнительной власти и государственных корпораций.

Основная функция Советов – выявление, отбор, формирование и мониторинг реализации комплексных научно-технических программ и проектов (КНТП), внесение предложений по их корректировке или прекращению, экспертное и аналитическое обеспечение реализации научно-технологического развития страны, а также формирование предложений по реализации государственной политики в сфере деятельности советов.

Поддержка проектов регламентируется 2 основными правительственные постановлениями: № 167 от 19 февраля 2019 г. и № 1439 от 15 сентября 2020г. Они регламентируют правила формирования и финансирования таких комплексных научно-технических программ. Согласно регламентирующими документам Комплексная научно-техническая программа – это совокупность скординированных по задачам, срокам и ресурсам комплексных проектов и мероприятий, включающих в себя все этапы инновационного цикла от получения научных и (или) научно-технических результатов до создания технологий, продуктов и услуг, их практического использования и выхода на рынок.

Цели и задачи КНТП заключаются в следующем. Комплексные научно-технические программы должны формироваться с учетом целей и основных задач научно-технологи-

ческого развития Российской Федерации, определенных Стратегией научно-технологического развития Российской Федерации, и быть направлены на:

- формирование условий для развития научной, научно-технической и инновационной деятельности и получения результатов, необходимых для создания технологий, продукции и оказания услуг, обеспечивающих повышение конкурентоспособности высокотехнологичного сектора экономики с негосударственным участием;
- создание групп перспективных и сквозных технологий, обеспечивающих максимальный мультиплекативный эффект от их применения и возможность создания принципиально новых продуктов (услуг) для модернизации действующих и формирования новых отраслей (рынков), обеспечивающих реализацию приоритетов научно-технологического развития Российской Федерации, определенных Стратегией;
- содействие в развитии кадрового потенциала сектора исследований и разработок, совершенствовании организационной, инфраструктурной, финансовой, информационной и правовой составляющих;
- получение положительного социально-экономического эффекта, повышение качества жизни общества и уровня национальной безопасности России, развитие ее интеллектуального капитала.



#### Регламент формирования КНТП:

1. Инициатором КНТП могут выступать заинтересованные органы государственной власти, члены советов по приоритетным направлениям научно-технологического развития Российской Федерации, организация реального сектора экономики, общественные объединения, институты развития, иные организации.

Инициатор КНТП направляет в профильный Совет по приоритетному направлению заявку на разработку КНТП по форме, установленной Министерством науки и высшего образования Российской Федерации.

2. Совет по приоритетному направлению проводит анализ заявки на наличие имеющихся научных заделов и научно-технических результатов, которые могут быть использованы для достижения целей предлагаемой к разработке КНТП, а также перспектив выхода на рынок предлагаемых к разработке технологий, продуктов и услуг и принимает решение о направлении в Координационный совет предложения о разработке КНТП;

3. Координационный совет (возглавляет Президент РАН академик Сергеев А.М.) рассматривает предложение о разработке КНТП, направленное советом по приоритетному направлению, и принимает решение о направлении в Правительство Российской Федерации предложения по разработке КНТП.

4. Правительство Российской Федерации по согласованию с президиумом Совета при Президенте Российской Федерации по науке и образованию принимает решение целесообразности формирования КНТП и определяет ее ответственного исполнителя – координатора (федеральный орган исполнительной власти, осуществляющий функции по выработке государственной политики и нормативно-правовому регулированию в сфере, соответствующей направлениям реализации комплексной программы) который разрабатывает взаимоувязанную по срокам и финансированию КНТП.

5. КНТП утверждается постановлением Правительства Российской Федерации.



При формировании заявки на КНТП предполагается наличие:

1. Ответственного исполнителя – координатора КНТП (ФОИВ, ГРБС) – это либо министерство, либо главный распорядитель бюджетных средств, например, Росатом или Роскосмос.

2. Соисполнителя КНТП – ФОИВ, ГРБС – это, как правило, Министерство науки и высшего образования, которое должно финансировать часть, связанную с фундаментальными исследованиями.

3. Заказчик – ОРСЭ (организации реального сектора экономики).

Таким образом, весь инновационный цикл разбивается на три части:

- 1-я часть – фундаментальные исследования.

• 2-я часть – разработка технологий, практически ориентированные исследования, за которые отвечает ответственный исполнитель и координатор и, соответственно, финансировать.

• 3-я часть – получение рыночных продуктов и вывод этих продуктов на рынок, за который отвечают и финансируют заказчики.

Инициатор КНТП должен сформировать эти три составные части: договорится с координатором, что он возьмет на себя такую функцию, договорится с Министерством науки и высшего образования, что, оно будет выступать Соисполнителем и будет финансировать фундаментальную часть, найти Заказчика, который возьмет на себя функцию практической реализации полученных результатов и вывода их на рынок.

Далее Инициатор формирует Заявку на разработку КНТП и выносит ее в Совет по соответствующему приоритету. Далее Совет по приоритету или заявку отклоняет, или, при одобрении, предлагает Инициатору сформировать Предложение о разработке КНТП (согласно Приказу №38н), выносит в Координационный совет (КС), который, при положительном решении, направляет его в Правительство РФ (Минобрнауки РФ). Правительство РФ, совместно с Президиумом Совета при Президенте по науке и образованию формирует

согласованное с КС предложение о разработке КНТП и выдает его ответственному исполнителю. Согласно регламенту разработка КНТП может длиться до 6 месяцев. Разработка КНТП идет в тесной связи между Ответственным исполнителем и Советом по приоритету.

За два года работы нашего Совета реально дошло до Правительства только 4 КНТП, в том числе «Новые композитные материалы: технологии конструирования и производства». Наш Совет рассмотрел заявку на эту КНТП еще в мае 2019 г. Вот почти уже 2 года она «ходит» по различным инстанциям.

Ответственным исполнителем-координатором по этой КНТП является ГК РОСАТОМ. Он очень активен и помогает в формировании КНТП. Инициаторы: МГУ им. М.В. Ломоносова и НИЦ Курчатовский институт. Соисполнители: Минобрнауки, Минпромторг, Минэкономразвития, Минстрой, Минэнерго, Росстандарт. Эта КНТП дошла до распоряжения Правительства в декабре 2020 г. о том, чтобы к 7 мая 2021 г. был разработан проект КНТП полного инновационного цикла «Новые композитные материалы: технологии конструирования и производства». Есть надежды, что эта КНТП заработает. Будут утверждены источники финансирования, перечень исполнителей, цели и задачи КНТП. Такие временные промежутки – практически 2 года – формирования КНТП неприемлемы. Именно с этим связано, что, если вначале в Совет поступало много заявок, то в настоящее время «портфель» пуст.

Правда, президент РАН академик Сергеев А.М дал поручение сформировать новую КНТП по аддитивным технологиям, в которой ответственным исполнителем-координатором будет РОСАТОМ, инициатором – Санкт-Петербургский политехнический институт. До конца марта 2021 г. эта заявка будет подготовлена.

Подводя итог, можно сказать, что процедура формирования КНТП довольно запутанная и длинная, источники финансирования непонятны. Положительный пример – это сотрудничество с РОСАТОМом. Предлагаю всем включиться в этот процесс, в частности в формирование КНТП по аддитивным технологиям и формирование новых заявок по тем перспективным направлениям, которые вы считаете нужными.

Доклад профессора, д.х.н. **Владислава Анатольевича Блатова**, директора Международного научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению (Самарский государственный технический университет), директора Межвузовского научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению (Самарский национальный исследовательский университет имени акад. С.П. Королева) «О прогнозировании новых материалов с использованием топологических методов» (презентация доклада приведена в *приложении 2*).



В докладе отмечено, что ускорение и удешевление разработки новых материалов является важной проблемой современного общества, науки, техники и промышленности. Традиционное решение этой проблемы основано на синтезе новых веществ, экспериментальном определении их структуры и измерении их физических свойств. В настоящее время для определения структуры и свойств материалов активно используются матема-

тические модели, построенные с использованием теории функционала плотности, молекулярной динамики или методов Монте-Карло. Как экспериментальный, так и теоретический подходы являются время- и ресурсозатратными и не используют в полной мере уже накопленную информацию по структуре и свойствам материалов. Альтернативой является создание баз знаний и систем искусственного интеллекта, основанных на экспериментально определенных и/или теоретически рассчитанных параметрах и корреляциях между ними и способных прогнозировать свойства материалов, используя найденные корреляции. Эффективным способом разработки систем искусственного интеллекта в материаловедении является топологический подход, в котором структура материала представляется в виде связанных объектов (атомов, полиатомных или полиздрических структурных групп, полостей и каналов, атомных сеток), что позволяет применить единую описательную и прогностическую схему для различных классов материалов и их свойств. Топологические методы классификации и анализа кристаллических структур дополняют традиционные геометрические методы, являются быстрыми, строгими и универсальными и могут быть легко адаптированы к конкретным задачам. Прогностическая способность геометрико-топологических подходов была продемонстрирована на многих классах неорганических, органических и гибридных материалов. В частности, топологические методы создали благодатную почву для конструирования координационных полимеров, обеспечив экспоненциальный рост их количества в течение последних 15 лет, и обусловили появление нового раздела науки – ретикулярной химии. Топологические методы обычно дают прогноз на качественном или полуколичественном уровне, поэтому в последние годы успешно развиваются комбинированные (гибридные) подходы, в которых возможности топологических методов по биг-дата анализу сочетаются с прецизионными методами математического моделирования материалов на микроуровне. Несмотря на то, что принципы топологического дизайна в настоящее время используют все чаще в мировой практике, в особенности для получения новых координационных соединений, топологические методы и их компьютерная реализация развиваются только в России, что определяет лидирующее положение отечественной науки в данной области.

Рассмотрено также в докладе современное состояние геометрико-топологических подходов к обработке больших объемов экспериментальной информации, перспективы развития комбинированных топологических и квантовомеханических методов, а также возможности их применения в кристаллохимии, физике твердого тела и материаловедении. Отмечается, что для успешной реализации Дорожной карты «Новые материалы и вещества» необходимо уделить особое внимание разработке систем искусственного интеллекта, в том числе баз знаний, содержащих корреляции «состав – структура – свойство материала»; при решении этих задач геометрико-топологические подходы играют важную, а в ряде случаев решающую роль.

Доклад профессора, д.ф.-м.н. **Владимира Ильича Анисимова**, руководителя Суперкомпьютерного центра дизайна перспективных материалов Института физики металлов УрО РАН, заведующего лабораторией оптики металлов «Разработка методов компьютерного моделирования материалов с сильными электронными корреляциями» (презентация доклада приведена в *приложении 3*).

Возможности стандартного метода вычисления электронной структуры основанного на функционале электронной плотности (DFT) велики: кроме электронной и магнитной структуры также в расчете возможно получить равновесную кристаллическую структуру, фононные спектры, упругие свойства и многое другое. Однако за последние десятилетия разработаны новые важные материалы, такие как высокотемпературные сверхпроводящие купраты, мanganиты с эффектом колоссального магнетосопротивления и многие другие. В этих материалах принципиально важным является учет эффекта кулоновских межэлектронных корреляций отсутствующих в формализме DFT.



Докладчик сообщил, что ими были разработаны методы DFT+U и DFT+DMFT позволяющие исследовать сильнокоррелированные материалы. Эти методы позволяют исследовать не только стехиометрические соединения но и неупорядоченные сплавы, что было продемонстрировано на примере изучения магнитной восприимчивости сплавов Fe-Mn и Fe-V и структурного перехода в сплаве Fe-Mn. Методы реализованы в пакете программ Amulet.

Примеры изученных систем:

- Минералы мантии Земли ферропериклас  $(Fe,Mg)O$  и перовскит  $(Fe,Mg)(Si,Al)O_{33}$  где исследованы переходы под давлением
- Низкоразмерные магнитные материалы: Димеры  $(MoCl_4, Y_5(Re,Mo)_2O_{12})$ ;
- Молекулярные магнетики  $(FeP(Im))$ ; Двухмерные магнетики  $(Li_2MnO_3; SrRu_2O_6)$ ;
- Мультиферроики  $(BiFeO_3, CdV_2O_4)$ .
- Постоянные магниты на основе интерметаллидов R-M (РЗМ и р-, d- элементов)
- Молекула гемоглобина и ее возможность связывать кислород
- Графен и двуслойный графен а также свойства атомов и молекул адсорбированных на нем
- Новые сверхпроводники на основе пниктидов и халькогенидов железа

Совместно с лабораторией А.Р. Оганова в Сколтехе ведется работа по объединению пакетов AMULET и USPEX

## Дискуссия и обсуждение

В дискуссии и обсуждении докладов, вызвавших большой интерес, приняли активное участие члены Совета и приглашенные. С вопросами и замечаниями, предложениями в проект решения выступали академики С.М. Алдошин, Е.Н. Каблов, чл.-корреспонденты РАН М.И. Алымов, А.Н. Озерин, профессора Р.З. Валиев, Колобов Ю.Р., Ткачев А.Г., приглашенные – академик И.А. Каляев, профессора Е.В. Александров, К.В. Боженко, В.В. Дремов, А.Р. Оганов, Д.Н. Песков.

## Решение Совета:

*Заслушав и обсудив доклады и сообщения:*

1. Сообщение академика Игоря Анатольевича Каляева, председателя Совета по приоритетному направлению Стратегии научно-технологического развития России «Переход к цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших данных, машинного обучения и искусственного интеллекта» «О формировании комплексных научно-технических программ полного инновационного цикла в области новых материалов».

2. Доклад профессора, д.х.н. Владислава Анатольевича Блатова, директора Международного научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению (Самарский государственный технический университет), директора Межвузовского научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению (Самарский национальный исследовательский университет имени акад. С.П. Королева) «О прогнозировании новых материалов с использованием топологических методов».
3. Доклад профессора, д.ф.-м.н. Владимира Ильича Анисимова, руководителя Суперкомпьютерного центра дизайна перспективных материалов Института физики металлов УрО РАН, заведующего лабораторией оптики металлов «Разработка методов компьютерного моделирования материалов с сильными электронными корреляциями»,

а также выступления членов Совета и приглашенных

*Научный Совет по материалам и наноматериалам вынес следующее решение, которое является объединяющим для всех заседаний, посвященных проблемам моделирования материалов, 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 иnano- 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. Скobelьцына и и НИВЦ 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 вышесказанного, 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 Pflops 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 диапазонах 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 долгосрочная поддержка 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 т. д.) существующих отечественных программ для дизайна материалов и баз данных.

\*\*\*

31 мая 2021 г. состоялось заседание Совета, положившее начало обсуждению такой важной темы, как **аддитивные технологии и материалы для них**. В силу сложившейся эпидемиологической обстановки заседание проходило в смешанном режиме – очно и в режиме ВКС со следующей повесткой:

1. Вступительное слово президента РАН, академика Александра Михайловича Сергеева.
2. Вступительное слово вице-президента РАН академика Валерия Григорьевича Бондура.
3. Вступительное слово председателя Научного совета РАН, академика Сергея Михайловича Алдошина.
4. Доклад Алексея Владимировича Дуба, Первого заместителя генерального директора АО «Наука и инновации» ГК "Росатом", д.т.н., профессора «Реализация научно-технической программы развития аддитивных технологий Госкорпорации «Росатом»».
5. Доклад Михаила Михайловича Бакрадзе, заместителя генерального директора ФГУП ВИАМ по металлическим материалам, к.т.н. «Проблемы развития аддитивных технологий в Российской Федерации».
6. Дискуссия, обсуждение

На открытии заседания председатель Научного совета РАН академик **Сергей Михайлович Алдошин** подчеркнул, что повестка, посвященная аддитивным технологиям «чрезвычайно важна», и продолжает тему цифровых подходов к созданию новых материалов, которая уже обсуждалась на Совете. Он подчеркнул, что начиная сессию заседаний, посвященных аддитивным технологиям, мы ставим задачу проведения анализа состояния проблемы в мире, в России и на этой основе подготовки аналитической записки для руководства Академии, органов государственной власти, профильных министерств и ведомств по развитию этого направления у нас в стране в соответствии с мировыми тенденциями.



По словам Президента РАН **Александра Михайловича Сергеева**, принявшего участие в заседании, аддитивные технологии – одно из ключевых направлений современного научно-технического прогресса, уже продемонстрировавшие существенное преимущество перед старыми технологиями. Он отметил, что еще в 2019 г. между ГК «Росатом» и Правительством РФ было заключено соглашение по новым материалам, в котором один из разделов был посвящен материалам, изготовленным с помощью аддитивных технологий. С 2021 г. основой для совместной работы всех игроков – от научных исследований до прототипа и промышленного производства – должна стать «Комплексная научно-техническая программа по аддитивным технологиям» (КНТП), в рамках которой государство готово выделять средства именно на НИР. Программа реализуется за счет множества конкретных проектов и, как подчеркнул Александр Сергеев, задача «науки» – институтов РАН, университетов – самым активным образом инициировать проекты для КНТП с высоким уровнем TRL (Technology Readiness Level – Ред.), и эффективно доводить научный результат, полученный в лаборатории, до изделия, которое заинтересует заказчика.

Вице-президент РАН академик **Валерий Григорьевич Бондур** почеркнул, что общий объем выделяемых средств на сформированные и формируемые КНТП составил 104 млрд. руб., при этом соотношение бюджетного и внебюджетного финансирования в некоторых программах составляет 50/50. «Во всех комплексных программах существенную часть играет научный блок, – уточнил В. Бондур. – Специфика такова, что участникам необходимо пройти цепочку от научных исследований – фундаментальных, прикладных – до конечных технологий, которые должен подхватить заказчик для конкретного производства».



Доклад Алексея Владимировича Дуба, Первого заместителя генерального директора АО «Наука и инновации» ГК "Росатом", д.т.н., профессора «Реализация научно-технической программы развития аддитивных технологий Госкорпорации «Росатом»» (презентация доклада приведена в *приложении 4*).



А.В. Дуб отметил, что динамика технологического развития в мире с каждым годом становится все выше, что обусловлено появлением «Производства 4.0», которое основано на цифровом моделировании, а также на широком применении аддитивного оборудования. Опыт ведущих игроков рынка аддитивного оборудования показывает, что для обеспечения наиболее эффективного внедрения аддитивных технологий в серийное производство, необходимо построить научно-производственную кооперацию, которая позволит предложить конкурентоспособное решение.

В связи с этим, совершенно понятно, что необходимо не только создать аддитивное оборудование, но и разработать технологии, программное обеспечение и материалы, иными словами – предложить комплексное решение. Именно в такой логике со стороны Госкорпорации «Росатом» инициированы взаимодополняющие друг друга проекты в области аддитивных технологий, успешная реализация которых позволит качественно повысить технологическую вооруженность отечественных предприятий.

На данном этапе необходимо не только разработать опытные технологии и оборудование, главная задача заключается в демонстрации возможностей производственных технологий нового типа на примере изготовления и проведения испытаний образцов целевых изделий.

Одна из главных задач при работе с новыми технологическими процессами — понять физические принципы воздействия лазерного излучения на материал. В НИОКР «Исследование влияния пучковой энергии в процессе СЛП» подробно изучены не только процессы, протекающие при плавлении металлического порошка мощным лазерным излучением, но и разработаны методы воздействия на размер зерна при кристаллизации материала, что позволяет управлять прочностными характеристиками материала.

Одними из главных преимуществ аддитивных методов производства является возможность получения сложных геометрий с одновременным увеличением коэффициента использования материалов. В связи с этим значительно расширяются технологические возможности в области работы с изделиями из сплавов с памятью формы. НИОКР «Разработка и материаловедческое обоснование создания материалов и изделий на основе сплавов с памятью формы с управляемой структурой и пьезоэлектрической керамики с применением аддитивных 4D-технологий» направлен на разработку перспективных материалов на основе сплавов с памятью формы с управляемой структурой и пьезоэлектрической керамики. В ходе работы будет получено материаловедческое обоснование получения и обработки сплавов с памятью формы методами 4D-печати.

Цифровое производство не получило бы качественного развития без программного обеспечения для решения тех или иных задач. Специалисты Госкорпорации «Росатом» это прекрасно понимают, поэтому в 2019 году был инициирован проект «Разработка программного обеспечения «Виртуальный принтер», результаты которого позволяют моделировать процесс селективного лазерного плавления на макро- и мезо-уровнях, прогнозировать прочностные характеристики синтезируемых изделий, а также проводить топологическую оптимизацию целевых изделий с учетом возможностей аддитивных технологий, что открывает новые возможности в области конструирования высокотехнологичных устройств.

Тем не менее, понимание процессов, протекающих при послойном синтезе изделий, а также возможность моделирования процессов, не исключает необходимости многофакторного контроля процесса в режиме «on-line». Такая задача решается в проекте «Контроль технологических процессов послойного лазерного сплавления» результаты реализации которого обеспечивают контроль качества получаемых изделий.

К сожалению, современные тенденции geopolитических отношений не позволяют рассчитывать на бесперебойные поставки критически важных комплектующих для отечественного аддитивного оборудования. Такая ситуация не остается без внимания в рамках Госкорпорации «Росатом», поэтому инициированы проекты по разработке двух- и трехосевых сканаторных систем, а также источников лазерного излучения. Стоит отметить, что разработка источников лазерного излучения и двухосевых сканаторов — задача производственная, направленная на повышение экономической эффективности. Однако, проект «Разработка трёхосевого лазерного сканатора» обладает научной новизной, основная задача которого состоит в разработке лазерно-оптической системы, которая позволяет не только контролировать температуру плавления в точке плавления диаметром 80 мкм, но и обеспечивает возможность подключения и сведения в одной точке постоянного и импульсного лазерного излучения для управления процессом кристаллизации ванны расплава.

Как было сказано выше, уже сегодня Госкорпорация «Росатом» обладает научным и технологическим заделами в области технологий, программного обеспечения для моделирования, систем контроля и лазерно-оптических комплектующих для процесса послойного синтеза. Реализация НИОКР «Разработка отечественной программно-аппаратной платформы (ПАП) управления аддитивным оборудованием» позволит объединить все современные разработки в составе отечественного оборудования, что сделает возможным синхронизацию работы каждой из перечисленных систем. Такой подход сбора и анализа данных в одной системе позволит создать алгоритмы машинного обучения, а также ляжет в основу системы интеллектуальной связи управления процессом послойного синтеза в режиме «on-line».

Реализация комплексного подхода в составе программно-аппаратной платформы позволит повысить эффективность отечественного оборудования, поэтому опытные образцы ПАП будут применены в НИОКР по разработке отечественных технологий и аддитивного оборудования:

1. НИОКР «Разработка аддитивных технологий печати металлических и композиционных изделий на оборудовании с высокотемпературным подогревом рабочего объема», в ходе которого будет разработана технология и оборудование высокотемпературного селективного лазерного плавления ( $t < 800^{\circ}\text{C}$ ) для синтеза целевых изделий из сплавов на базе гамма-алюминида титана (TiAl), Inconel 718, а также дисперсно-упрочненных композиционных материалов на базе никелевых сплавов;

2. НИОКР «Разработка аддитивных технологий печати металлических и композиционных изделий на оборудовании с высокотемпературным подогревом рабочего объема» направлен разработку технологии и оборудования для печати изделий из реакционных, тугоплавких и композиционных материалов методом селективного электронно-лучевого плавления с высокотемпературным подогревом;

3. НИОКР «Разработка технологий и аддитивного оборудования прямого выращивания заготовок элементов внеядерного острова и пространственных изделий с применением проволочных материалов» позволит получить технологию, материалы и оборудование для изготовления крупногабаритных изделий из коррозионностойких и титановых сплавов для нужд авиационной и атомной отраслей.

4. НИОКР «Разработка технологий и оборудования производства керамических и композиционных изделий методами аддитивных технологий» решает задачу разработки технологий 3D-печати заготовок композиционных основ под силицирование на основе порошкообразного карбида кремния, различных форм углерода и синтетического связующего для получения сложнопрофильных изделий с заданным уровнем свойств;

5. НИОКР «Разработка технологий и оборудования для изготовления изделий из полимерных материалов методами аддитивных технологий» нацелен на создание полимерных и полимерных композиционных материалов (далее ПКМ) на основе конструкционных термопластов и гибридных наполнителей для применения их в аддитивном производстве.

6. НИОКР «Разработка 3D-оборудования и технологий для печати металлических изделий по технологии электронно-лучевого сплавления с применением отечественных электронных пушек и систем сканирования» направлена на разработку технологии получения сверхчистых крупногабаритных заготовок изделий из проволоки для нужд атомной энергетики, что позволит повысить экономическую эффективность изготовления целевых изделий за счет увеличения коэффициента использования материалов и скорости изготовления.

7. НИОКР «Разработка комплекса технологий и оборудования для аддитивного производства сложнопрофильных и крупногабаритных изделий атомной энергетики» решает задачу оптимизации конструкции и материальных затрат при изготовлении внутрикорпусного устройства реактора (выгородка) с применением технологии прямой лазерной наплавки металлического порошка.

Таким образом, уже к 2024 году Госкорпорация «Росатом» будет обладать значительным и разносторонним заделом в области аддитивных технологий, что позволит предложить комплексное решение для оптимизации существующих технологических линий, а также быстрого изготовления новых перспективных продуктов.

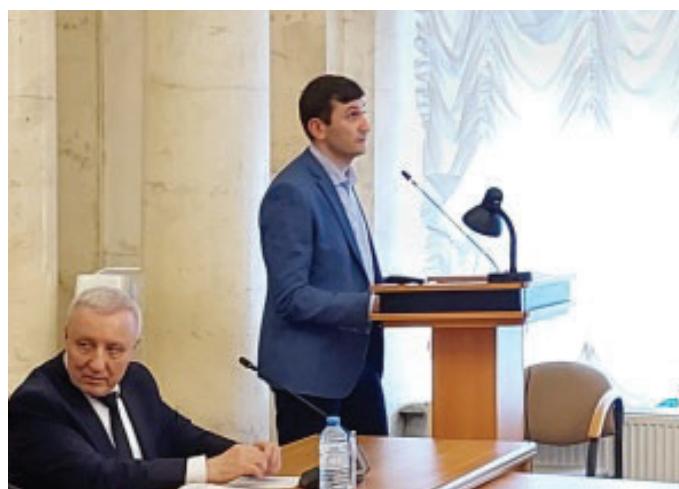
Доклад **Михаила Михайловича Бакрадзе**, заместителя генерального директора ФГУП ВИАМ по металлическим материалам, к.т.н. «Проблемы развития аддитивных технологий в Российской Федерации» (презентация доклада приведена в *приложении 5*).

Докладчик начал с того, что Стратегия научно-технологического развития Российской Федерации, утвержденная Указом Президента Российской Федерации от 1 декабря 2016 г.

№ 642, определила приоритетное направление – «Переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта».

Данному направлению полностью соответствуют аддитивные технологии, которые являются доминантой нового, VI технологического уклада и одной из главных мировых тенденций принципиального изменения облика промышленного производства.

Ежегодный устойчивый тренд финансового роста отрасли аддитивного производства обусловлен планомерным освоением материаловедами, технологами и конструкторами новых возможностей. Это, в частности, изготовление агрегатов в виде единой конструкции, исключая сварные и паяные соединения, снижение массы элементов конструкций до 50%; повышение производительности технологии изготовления до 30 раз, создание элементов конструкций любой оптимальной сложности и формы, которые невозможно изготовить по традиционным технологиям, а также повышение коэффициента использования материалов до 0,98.



В соответствии со сформированной в мировом научном сообществе концепцией аддитивные технологии делятся на три уровня. Первый уровень – это изготовление оснастки, выжигаемых и выплавляемых моделей для производства деталей методом точного литья. Второй уровень включает в себя производство прототипов деталей для отработки разрабатываемых конструкций. Третий – изготовление деталей для проведения стендовых и натурных испытаний, удовлетворяющих требованиям нормативной и конструкторской документации, с последующей организацией их серийного производства.

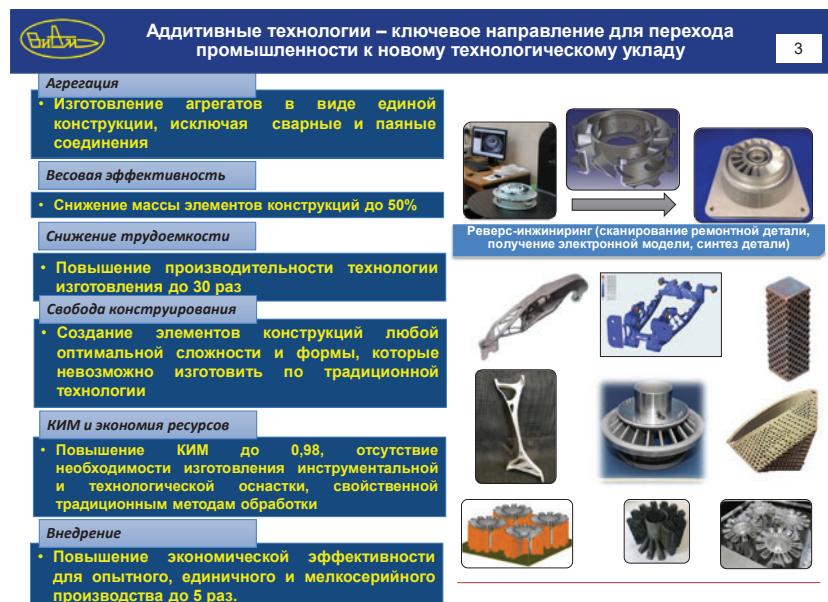
Реализация аддитивных технологий третьего уровня является сложнейшей задачей, которая может быть решена только в рамках парадигмы единого материаловедческого сопровождения на всех стадиях создания материала и изделия: «материал – технология – конструкция – оборудование» с обязательным созданием крупных научных центров, обладающих полным циклом аддитивного производства.

Доля Российской Федерации на мировом рынке аддитивных технологий в настоящее время составляет всего 1,5%, а соотношение количества деталей третьего уровня к демонстраторам – 3 к 97. В то же время в США и Евросоюзе уже изготавливается 30% ресурсных деталей третьего уровня для сложных технических систем, что свидетельствует о нашем тридцатикратном отставании.

Успешным примером реализации третьего уровня аддитивных технологий является Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов (ВИАМ), в котором создан первый и единственный в нашей стране полный (замкнутый) цикл аддитивного производства.

С 2014 года специалистами института разработано шесть уникальных сплавов для аддитивных технологий, имеющих неоспоримые преимущества перед зарубежными материалами. Завершен вывод на рынок более

30 адаптированных сплавов, которые хорошо знакомы конструкторским бюро и серийным заводам. В их числе не имеющий аналогов в мире жаропрочный сплав на основе интерметаллида никеля марки ВИН6 с рабочей температурой 1200°C, а также превосходящие зарубежные аналоги жаропрочный сплав на кобальтовой основе марки ВЛК1, сталь ВНЛ14 и сплав на основе алюминия марки ВАС1.



Создан специализированный научно-производственный комплекс по выпуску специализированных высокочистых, с содержанием примесей менее 5 ppm, литых заготовок для распыления мощностью до 400 тонн в год. Научно-производственный комплекс института по разработке опытных и серийных технологий изготовления металлических порошков представлен тремя атомайзерами и участком физико-механической обработки металлических порошков для создания металлопорошковых композиций (МПК) заданного фракционного состава применительно ко всем аддитивным технологиям: селективному лазерному сплавлению, селективному электронно-лучевому сплавлению, прямому лазерному выращиванию. Мощность участка до 190 тонн в год.

Комплекс аддитивного производства ВИАМ представлен промышленным оборудованием ведущих мировых производителей, включая установки селективного лазерного сплавления для изготовления сложнопрофильных деталей из свариваемых и ограничено свариваемых материалов, электронно-лучевой сварки для изготовления сложнопрофильных деталей из несвариваемых литейных материалов и прямого лазерного выращивания для изготовления крупногабаритных корпусных деталей.

Для создания деталей третьего уровня необходимо проведение комплексных исследований, направленных на разработку режимов синтеза отечественных МПК, термической и газостатической обработки, по результатам которых разрабатывается и выпускается полный комплект нормативно-технической документации.

Наиболее трудоемкий процесс – разработка режимов синтеза. Современное оборудование для селективного лазерного сплавления имеет от 150 до 200 изменяемых параметров, из которых около 80 отвечают только за формирование поверхностей изделий.

Общая квалификация (паспортизация) материалов, синтезированных методами аддитивного производства, является завершающим этапом их создания перед внедрением в производство ответственных деталей третьего уровня.

Ярким примером внедрения аддитивных технологий в серийное производство является деталь «завихритель» фронтового устройства камеры сгорания турбореактивного двухконтурного двигателя ПД-14 для ближне-среднемагистральный самолета МС-21. Это первая российская ресурсная деталь третьего уровня, полученная из отечественной МПК разработки ВИАМ. Технология синтеза «завихрителя» была разработана в нашем институте в 2014 году по заказу АО «ОДК-Авиадвигатель» с проведением сначала стендовых, а потом и натурных испытаний. За период 2014–2020 гг. по разработанной технологии изготовлено и поставлено 18 моторокомплектов. Сегодня «завихрители» для ПД-14 серийно производятся только по аддитивной технологии.

Созданная институтом инфраструктура аддитивного производства позволила в рамках заключенных 43 соглашений о сотрудничестве с предприятиями авиационной, атомной, энергетической, ракетно-космической промышленности, ведущими вузами и институтами РАН в 2019–2020 годах разработать технологии изготовления МПК и полимерных композиций, технологии синтеза деталей, термической, баротермической и постобработок 116 типов ответственных деталей третьего уровня в количестве более

1300 шт. При этом план производства 2021 года 114 типов ответственных деталей 3 уровня в количестве более 5000 шт., что в 6 раз превышает показатель 2020 г.

Однако необходимо отметить ключевые проблемы, тормозящие развитие и внедрение аддитивных технологий в России, это отсутствие:

- координационной деятельности научных организаций, производственных предприятий по внедрению цифровых и аддитивных технологий нового поколения, включая трансфер технологий и научно-техническое сопровождение, в том числе в рамках реализации крупных инновационных проектов полного цикла, направленных на создание технологических решений, обеспечивающих полный «жизненный» цикл – от получения исходного сырья до конечных продуктов (инновационных изделий) в различных отраслях промышленности, с учетом задач государственных корпораций, интегрированных структур и критических технологий развития науки, техники и технологий;
- отечественного программного обеспечения для управления процессами аддитивного производства, топологической оптимизации, подготовки электронных моделей к печати, управления жизненным циклом продукции аддитивного производства;
- разработки и серийного производства отечественного оборудования (на российской компонентной базе, включая лазеры, сканаторы, микроконтроллеры, электронно-лучевые пушки) для технологий селективного лазерного сплавления, селективного электронно-лучевого сплавления и прямого лазерного выращивания;
- методик и технологий неразрушающего контроля изделий аддитивного производства;
- системы подготовки кадров высшей квалификации с компетенциями в области аддитивных технологий.

Для системного решения указанных проблем необходимо создание центра «Материалы и цифровые технологии их производства», который обеспечивал бы системную координацию и мониторинг работ в области материалов и аддитивных технологий в Российской Федерации, а также передачу серийных материалов и технологий в промышленные центры аддитивного производства.

Далее выступил член Совета член-корр. РАН **Виктор Владимирович Иванов** с просьбой поддержать и подписать письмо, адресованное Директору Департамента государственной политики в сфере высшего образования Министерства науки и образования РФ Рябко Татьяне Васильевне следующего содержания:

Научный совет РАН по материалам и наноматериалам выражает обеспокоенность с отнесением в проекте приказа "Об утверждении перечней специальностей и направлений подготовки высшего образования" (<https://regulation.gov.ru/projects#npa=115846>), Укрупненной группы специальностей и направлений (УГСН) подготовки «Нанотехнологии и

наноматериалы» в раздел 21 «Химические технологии и технологии материалов» и УГСН «Химия» в раздел 02 «Естественные науки».



Отнесение УГСН «Нанотехнологии и наноматериалы» в раздел 21 «Химические технологии и технологии материалов» не отражает ключевой ее особенности – междисциплинарности этой современной отрасли знаний. УГСН «Нанотехнологии и наноматериалы» – одна из новых и перспективных групп направлений подготовки высшего образования для науки и технологий будущего. Для качественного образования в области нанотехнологий в проекте Перечня просим восстановить укрупненную группу «Нанотехнологии и наноматериалы», которая включает сформированные за последние годы актуальные, сбалансированные при участии работодателей высокотехнологичной сферы направления образования, в том числе «Нанотехнологии и микросистемная техника», «Наноинженерия», «Нanosистемы и наноматериалы».

Целесообразно сохранить существующую УГСН «Химия» без отнесения ее в раздел 02 «Естественные науки» и изменить название на УГСН «Химические науки», закрепив за ней следующие специальности и направления подготовки: «Химия», «Химия, физика и механика материалов», «Фундаментальная и прикладная химия» и «Фундаментальная физико-химическая инженерия». Это позволит в рамках одного УГСН обеспечить единое предметное ядро или содержание, формирование единого набора общепрофессиональных компетенций и структуры учебного плана.

### **Дискуссия и обсуждение**

В дискуссии и обсуждении докладов, вызвавших большой интерес, приняли активное участие члены Совета и приглашенные. С вопросами и замечаниями, предложениями в проект решения выступали академики А.М. Сергеев, С.М. Алдошин, Н.П. Алешин, В.М. Бузник, В.И. Лысак, Л.И. Леонтьев, чл.-корреспонденты РАН М.И. Карпов, А.Н. Озерин, И.В. Мелихов, профессора В.Н. Санин, Колобов Ю.Р., приглашенные – профессора В.В. Сергеев, С.Ю. Хаширова, О.В. Коплак.

### **Решение Совета:**

*Заслушав и обсудив доклады:*

1. Доклад Алексея Владимировича Дуба, Первого заместителя генерального директора АО «Наука и инновации» ГК «Росатом», д.т.н., профессора «Реализация научно-технической программы развития аддитивных технологий Госкорпорации „Росатом“».

2. Доклад Михаила Михайловича Бакрадзе, заместителя генерального директора ФГУП ВИАМ по металлическим материалам, к.т.н. «Проблемы развития аддитивных технологий в Российской Федерации»

а также выступления членов Совета и приглашенных

*Научный Совет по материалам и наноматериалам решил:*

1. Провести очередное заседание, посвященное аддитивным технологиям, предварительно собрав от членов Совета предложения для рассмотрения возможности их включения в КНТП по аддитивным технологиям.
2. Составить объединенное, на основе проведения цикла заседаний, решение Научного совета РАН по проблеме аддитивных технологий.
3. Поддержать предложение члена Совета член-корр. РАН В.В. Иванова о целесообразности сохранения существующей УГСН «Химия» без отнесения ее в раздел 02 «Естественные науки» и изменения названия на УГСН «Химические науки», закрепив за ней следующие специальности и направления подготовки: «Химия», «Химия, физика и механика материалов», «Фундаментальная и прикладная химия» и «Фундаментальная физико-химическая инженерия». Это позволит в рамках одного УГСН обеспечить единое предметное ядро или содержание, формирование единого набора общепрофессиональных компетенций и структуры учебного плана.

\*\*\*

В соответствии с решением Совета 29 июня 2021 г. прошло второе заседание, посвященное **аддитивным технологиям и материалам для них** со следующей повесткой:

1. Вступительное слово председателя Научного совета РАН, академика Сергея Михайловича Алдошина.
2. Доклад генерального директора АО «Композит», д.т.н. Александра Германовича Береснева; первого заместителя генерального директора, д.т.н. А.Н. Тимофеева; начальника Комплекса "Металлические материалы", к.т.н. М.С. Гусакова; начальника Отделения металлических материалов и металлургических технологий, д.т.н. А.И. Логачевой «Аддитивные технологии: отечественный и зарубежный опыт, состояние и перспективы промышленного освоения в ракетно-космической промышленности, ключевые направления исследований и развития технологий».
3. Сообщение чл.-корр. РАН, г.н.с. ИФТТ РАН Михаила Ивановича Карпова, начальника Отделения металлических материалов и металлургических технологий АО «Композит», д.т.н. А.И. Логачевой «Технология получения гранул из жаропрочных сплавов на основе тугоплавких металлов: Mo, W, Nb, Ta, основанная на газовой атомизации электродов, изготовленных методом вакуумной электронно-лучевой плавки».
4. Доклад ректора Санкт-Петербургского Государственного морского технического университета, д.т.н. Глеба Андреевича Туричина; Е.В. Землякова, К.Д. Бабкина, Е.А. Валдайцевой, О.Г. Климова «Теоретические основы и перспективы промышленного применения технологии прямого лазерного выращивания».
5. Доклад и.о. проректора по научно-исследовательской работе Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова, д.х.н. Светланы Юрьевны Хашировой «Полимерные материалы в аддитивных технологиях. Современное состояние и перспективы развития в Российской Федерации».
6. Сообщение д.б.н. Ивана Всееволодовича Гмошинского, В.А. Шипелина ФГБУН «ФИЦ питания и биотехнологии» «Риски для здоровья человека, связанные с применением аддитивных технологий: зарубежный опыт».
7. Дискуссия, обсуждение



Доклад генерального директора АО «Композит», д.т.н. **Александра Германовича Береснева с соавторами «Аддитивные технологии: отечественный и зарубежный опыт, состояние и перспективы промышленного освоения в ракетно-космической промышленности, ключевые направления исследований и развития технологий»** (презентация доклада представлена в *приложении 6*).

А.Г. Берсенев отметил, что специфика продукции ракетно-космической промышленности (РКП) определила для начального этапа освоения аддитивных технологий (АТ) основные технические и экономические ожидания, а также - приоритеты в части материалов, технологий, оборудования, способов постобработки. В частности, основной акцент сделан на металлические материалы и продукцию ракетного двигателестроения.

Оценка существующего опыта освоения аддитивных технологий в ракетно-космической промышленности заключается в том, что сформирован полный производственный цикл, последовательное развитие и совершенствование которого позволяет выходить на производство деталей третьего уровня, эффективно применяемых в серийной продукции. При этом подтверждается и поддерживается комплексный подход к развитию и внедрению АТ: создание новых материалов, оборудования, методов контроля, программного обеспечения, разработка стандартов и единой информационной платформы. Особо выделена значимость работ по направлению "Газостатическая обработка применительно к аддитивному производству": включение процесса горячего изостатического прессования (ГИП) в технологическую линию аддитивного производства деталей из металлических материалов позволяет в значительной степени преодолеть неопределенность результатов (в первую очередь - в части свойств формируемых АТ материалов), инициируемую сложностью процесса (варьируется до 250 и более параметров), и, по-существу, сократить путь к практическому использованию АТ-деталей в ответственных конструкциях. Опыт промышленного применения ГИП (в том числе – востребованность процесса) подтверждает актуальность восстановления отечественного производства газостатов. В части разработки отечественного оборудования для аддитивного производства – один из приоритетов (с точки зрения потребностей РКП): возможность построения крупногабаритных конструкций (диаметр – свыше 4 метров).

Приоритетные направления научных исследований, результаты которых призваны обеспечить перспективные потребности (новые проекты) РКП и которые включают АТ как необходимый инструмент выхода на качественно новые параметры ракетно-космической техники:

- создание и адаптация к аддитивным технологиям новых высокотемпературных материалов (металлических, интерметаллидных, керамических),
- создание и объединение цифровых двойников по полному циклу аддитивного производства.

В небольшом сообщении (презентация представлена в *приложении 7*) «Технология получения гранул из жаропрочных сплавов на основе тугоплавких металлов: Mo, W, Nb,

Та, основанная на газовой атомизации электродов, изготовленных методом вакуумной электронно-лучевой плавки» чл.-корр. РАН, г.н.с. ИФТТ РАН **Михаил Иванович Карпов** от себя и начальника Отделения металлических материалов и металлургических технологий АО «Композит», д.т.н. А.И. Логачевой доложил о возможностях ОАО «Композит» и ИФТТ РАН по промышленному производству гранул из жаропрочных тугоплавких сплавов на основе, молибдена, вольфрама, ниобия, tantalа, титана для применения в аддитивных технологиях.



Технология включает выплавку слитков методом электронно-лучевой плавки, позволяющую получение сплавов высокой чистоты по вредным примесям и последующее получение гранул методом газовой атомизации. В презентации показаны вид, структура, фракционный состав гранул, полученных из двух жаропрочных сплавов на основе молибдена, а также представлены результаты опробования полученных гранул для изготовления методом последовательного применения высокотемпературного газостатического прессования компактных заготовок и их последующей горячей деформации до получения листовых образцов. Предложенная технология позволяет получать крупногабаритные изделия из жаропрочных тугоплавких сплавов.

Доклад ректора Санкт-Петербургского Государственного морского технического университета, д.т.н. **Глеба Андреевича Туричина** с соавторами «Теоретические основы и перспективы промышленного применения технологии прямого лазерного выращивания» (презентация доклада представлена в *приложении 8*).



Докладчик отметил, что интенсивное развитие аддитивных технологий в последние годы позволяет значительно усовершенствовать методы изготовления и обработки изделий, а также их ремонта. Замена технологий литья и механической обработки на выращивание часто позволяет значительно снизить себестоимость детали, что особенно актуально в таких отраслях, как газотурбинное двигателестроение, авиация, космонавтика.

Основной проблемой в развитии аддитивных технологий является необходимость существенного увеличения их производительности при сохранении требуемого качества выращиваемого изделия.

Одной из перспективных технологий высокоскоростного изготовления изделий, в особенности крупногабаритных, является прямое лазерное выращивание, когда изделие формируется из порошка, подаваемого сжатой газопорошковой струей непосредственно в зону выращивания, вместе с лазерным лучом, обеспечивающим нагрев и частичное плавление порошка и подложки. При этом возможно вводить в подающую струю смеси порошков различных материалов, и изменять состав подаваемых порошков непосредственно в ходе процесса выращивания, обеспечивая высокоскоростное формирование биметаллических изделий и изделий с градиентными свойствами.

Проведенные авторами теоретические и экспериментальные исследования физических, термомеханических и металлургических процессов при лазерной наплавке и прямом лазерном выращивании позволили построить физически-адекватную теорию процесса, определить условия его устойчивого протекания, разработать принципы управления структурой и свойствами материалов при прямом лазерном выращивании. На этой основе были созданы технологические установки и реализованы технологические процессы для промышленных предприятий. Результаты проведенных исследований показали, что разработанная технология прямого лазерного выращивания, несмотря на свою технологическую сложность, может заменить используемые ныне технологии, обеспечив многократное повышение производительности и экономию материала. В Институте лазерных и сварочных технологий СПбГМТУ разработан и серийно выпускается типоразмерный ряд технологических установок прямого лазерного выращивания, работающих сейчас на предприятиях ОСК, ОДК и Роснефти, модульность которых позволяет использовать их для изготовления и ремонта металлических деталей габаритами до 2 м, в том числе на борту кораблей. В настоящее время по заказам Росатома и Роскосмоса ведутся работы по проектированию машин больших габаритов и производительности, разработке технологий выращивания изделий из алюминиевых сплавов, компонентов реакторной и ракетно-космической техники. Такие машины и технологии могут быть востребованы в Арктике и других труднодоступных регионах, обеспечивая текущий ремонт сложной техники непосредственно в местах ее применения.

Доклад и.о. проректора по научно-исследовательской работе Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова, д.х.н. **Светланы Юрьевны Хашировой** «Полимерные материалы в аддитивных технологиях. Современное состояние и перспективы развития в Российской Федерации» (презентация доклада представлена в *приложении 9*).



В последние годы аддитивные технологии получили значительное развитие и широкое распространение в химии и технологии полимеров наряду с существующими традиционными способами переработки. Для реализации потенциала полимерных материалов в аддитивных технологиях необходимы серьезные фундаментальные исследования в кооп-

рации с разработчиками аддитивного оборудования, особенно в области создания новых композиционных материалов.

В докладе представлен аналитический обзор аддитивных технологий с применением полимерных материалов. В основе методов 3D печати полимерами лежат процессы фото полимеризации, экструзионной переработки и сплавления (спекания) полимерного порошка. Каждый метод предъявляет особенные требования к структуре и свойствам полимерных материалов. Рассмотрены комплексные требования к полимерам и композитам для применения в различных методах аддитивных технологий, показаны фундаментальные проблемы и перспективы развития каждого метода в стране.

Развитие в стране стереолитографии, в основе которой лежат процессы фотополимеризации, несмотря на наличие отечественного оборудования, сдерживается в первую очередь крайне ограниченным рынком отечественного сырья (нелетучих метакрилатов в стране всего несколько наименований, фотоинициаторы для стереолитографии в России не разрабатываются). Сам метод требует решения ряда фундаментальных задач, связанных с синтезом мономеров со строго регулируемой молекуллярной массой, решением проблем использования пигментов и красителей, получением бесцветных фотополимеров с высокой степенью прозрачности и гомогенности, повышением физико-механических свойств напечатанных изделий.

### Аддитивные технологии - преимущества



Отмечено, что в России уже имеются интересные решения для повышения эксплуатационных свойств изделий, полученных стереолитографией. В частности, в Волгоградском государственном техническом университете разработан ряд рецептур фотополимерных композиций для 3D печати, характеристики которых достигают свойств инженерных пластиков. В Байкальском институте природопользования СО РАН совместно с сотрудниками Института фотонных технологий ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Первого Московского государственного медицинского университета им. И.М. Сеченова и Института химической физики им. Н.Н. Семенова РАН разработаны новые фоточувствительные композиции на основе полибензимидазолов, которые могут использоваться для получения объемных изделий с использованием стереолитографии с получением 3D-печатных изделий с высокой термостойкостью (температура 10%-ной потери массы до 495 °C) и механической прочностью (прочность на разрыв до 160 МПа, удлинение при разрыве 64%).

Для изготовления функциональных изделий с высокой точностью и сложнейшей геометрией наиболее перспективным является сплавление (спекание) полимерного порошка под воздействием лазерного излучения. Согласно прогнозам, потребности в полимерных

порошках для SLS технологий увеличится с 13 до 33 % к 2027 году в связи с переходом от моделирования к производству готовой продукции.

Внедрение в отечественные отрасли метода селективного лазерного спекания (SLS) полимерных порошков требует решения масштабных задач как области разработки материалов, так и оборудования. В настоящее время полиамид 12 (PA 12) - основной и почти эксклюзивный вариант для метода SLS. Полимерные порошки PA 12 для 3D печати в стране не производятся. Разработкой технологии получения полиамида 12 (PA 12) для SLS занимаются сейчас в ВИАМ.

В последние несколько лет в Кабардино-Балкарском государственном университете им. Х.М. Бербекова на базе Центра прогрессивных материалов и аддитивных технологий в рамках проектов Фонда перспективных исследований и Минобрнауки РФ была проведена большая работа в области развития аддитивных технологий. Разработана целая линейка отечественных порошков суперконструкционных полимеров для аддитивных технологий и создан первый в РФ образец оборудования для селективного лазерного спекания высокотермостойких полимеров с отечественным программным обеспечением, который сейчас передан в АО «Композит» Госкорпорации Роскосмос. Ближайший и единственный в мире аналог: Electro Optical Systems P800 (Германия) недоступен в нашей стране. Преимущества отечественного образца: позволяет уменьшать зону спекания для изготовления лабораторных образцов, подходит для проведения исследований процесса и материалов.

Несмотря на большое количество публикаций, в области 3D печати полимерных порошков, появившихся с 2014 года, фундаментальные основы спекания полимерных порошков в мире еще не сформированы. Не разработаны воспроизводимые методы получения порошков для 3D печати нужной структуры, размера, сферичности и сыпучести, не решены проблемы пористости и высокой шероховатости изделий. Требуются новые решения не только в области материалов, но и по оптимизации конструкции оборудования для SLS, в частности, для снижения высокого расхода материала (минимальная загрузка 10 кг, даже если изделие будет весить 10 г).

### Полимерные материалы в аддитивных технологиях

#### АДДИТИВНАЯ ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИМЕРОВ



4

Для развития технологии SLS не только в стране, но и в мире также необходимо расширение ассортимента полимерных порошков, в том числе, доступных кристаллических полиолефинов ПП, ПЭ.

Наиболее активными темпами в стране развиваются аддитивные технологии, в основе которых лежат процессы экструзионной переработки полимерных материалов. Это обусловлено доступностью материалов и оборудования, наличием российских производителей 3D-принтеров и филаментов, возможностью печати полимерными композиционными материалами.

Однако и здесь имеется ряд нерешенных к настоящему времени фундаментальных проблем. В частности, необходимо решить задачу повышения межслоевой адгезии для кристаллических и наполненных полимеров, проблемы, связанные с нарушением геометрии при печати объемных изделий из кристаллизующихся полимеров. Мало развиты исследования в области снижения пористости изделий, получения композитов для 3D печати, в том числе высоконаполненных; разработки материалов поддержки, особенно для высокотермостойких полимеров и композитов.

В докладе рассмотрены конкретные примеры проблем, возникающих при 3D печати аморфными и кристаллическими суперконструкционными полимерами, волокнонаполненными композитами и способы их решения, разработанные в Центре прогрессивных материалов и аддитивных технологий КБГУ. Приведены новые подходы к модификации полимеров и композитов для их адаптации к аддитивным технологиям и получения напечатанных изделий с физико-механическими характеристиками, не уступающими литьевым.

Для адаптации полимерных материалов к аддитивным технологиям в Центре прогрессивных материалов и аддитивных технологий был задействован полный цикл, начиная от новых подходов к синтезу самих материалов, в частности, суперконструкционных полимеров, получения композиционных материалов на их основе с вовлечением нетрадиционных систем для пластификации высоконаполненных композитов и аппретирования наполнителей до отработки технологии печати из разработанных материалов функциональных изделий. Все это позволило получить опыт сразу в различных направлениях аддитивных технологий, использующих как порошковые полимерные материалы, так и пластиковые нити.

В настоящее время работы Центра направлены на создание суперконструкционных композиционных материалов для печати высоконагруженных изделий, которые востребованы в машиностроении, космической отрасли и других сферах, где аддитивные технологии в совокупности с полимерными материалами нового поколения могут быть эффективны.

### **Аддитивные технологии - выводы**



40

Можно говорить и о первых серьезных результатах в направлении медицины, в частности в имплантации. Это стало возможным благодаря сотрудничеству вуза с Научно-исследовательским институтом неотложной детской хирургии и травматологии Департамента здравоохранения города Москвы и Институтом патофизиологии РАН. К настоящему времени разработана модель трепанированного черепа, которая может стать основой для проведения доклинических испытаний новых медицинских имплантатов. С использованием этой модели лабораторным крысам были установлены имплантаты из синтезированного ПЭЭК, напечатанные в КБГУ по снимкам КТ индивидуально для каждой крысы. Доклинические испытания успешно завершаются, гистологические исследования и МРТ

снимки крыс показали, что имплантат хорошо прижился и не препятствует восстановлению собственной ткани.

Развитие аддитивных технологий в стране неразрывно связано и с подготовкой кадров. В данный момент в КБГУ в рамках направления «химическая технология» ведется подготовка специалистов в области аддитивных технологий, применяющих полимерные материалы, в стадии лицензирования сетевая образовательная программа с Санкт-Петербургским политехническим университетом Петра Великого «Компьютерный инжиниринг и цифровое производство».

В докладе показаны перспективные области применения напечатанных изделий из полимеров и композитов для авиакосмической, оборонной отрасли и медицины.

Таким образом, сегодня аддитивные технологии являются перспективным и стремительно развивающимся направлением исследований. Поскольку технологии относительно новые, мировой научно-технический задел в данной области исследований только формируется. Наблюдается недостаток исследований как в области создания полимерных материалов и оборудования для аддитивных технологий, так и в области технологии их переработки с применением 3D печати. С появлением аддитивных технологий открылась также новая область химии и технологии полимерных материалов для 3D и 4D печати фундаментальные основы которой нам еще предстоит сформировать.

В заключении отмечено, что если формирование аддитивных технологий происходило от производителя оборудования к материалу, то перспективы их дальнейшего развития в стране и мире связаны прежде всего с тесным взаимодействием разработчиков оборудования, материалов и конструкции.

В сообщении д.б.н. **Ивана Всеволодовича Гмошинского** и В.А. Шипелина ФГБУН «ФИЦ питания и биотехнологии» «Риски для здоровья человека, связанные с применением аддитивных технологий: зарубежный опыт» отмечено, что при работе оборудования, использующего аддитивные технологии (3D-принтеров) (презентация приведена в *приложении 10*), происходит эмиссия частиц различного размера и состава в воздух рабочей зоны. Частицы полимеров и металлов, используемых при 3D печати, потенциально могут быть опасны для здоровья работников предприятия в случае ингаляции. Энергодисперсионный рентгеновский анализ отдельных частиц качественно выявил потенциальные профессиональные канцерогены (хром, никель), а также химически активные металлы, участвующие в образовании активных форм кислорода (железо, цинк). Моделирование отложения в легких показывает, что около 15–37% выбрасываемых частиц осаждаются в легочной области (альвеолах).



Свое выступление докладчик завершил следующим заключением:

1. Необходимо проведение исследований по идентификации и оценке количества частиц (в том числе находящихся в нанодиапазоне размеров), поступающих в воздух рабочей зоны в процессе 3D-печати полимерными и металлическими материалами.

2. Необходимо проведение исследований по оценке рисков для здоровья основных типов аэрозольных частиц, эмиссия которых характерна для использования аддитивных технологий.
3. Необходима разработка комплекса мер по защите здоровья работников производств в области аддитивных технологий от воздействия вредных факторов (ингалируемые частицы металлов и полимеров, пары химических реагентов).
4. Необходима разработка комплекса мер по информационной защите производств, использующих аддитивные технологии, от несанкционированного доступа, пред следующего враждебные и/или криминальные цели.

## **Дискуссия и обсуждение**

В дискуссии и обсуждении докладов, вызвавших большой интерес, приняли активное участие члены Совета и приглашенные. С вопросами и замечаниями, предложениями в проект решения выступали академики С.М. Алдошин, Е.Н. Каблов, Н.З. Ляхов, Л.Б. Бойнович, чл.-корреспонденты РАН М.И. Карпов, И.В. Мелихов, В.В. Иванов, профессор Э.Р. Бадамшина, приглашенные – О.Г. Оспенникова.

## **Решение Совета:**

*Заслушав и обсудив доклады:*

1. Доклад генерального директора АО «Композит», д.т.н. Александра Германовича Береснева «Аддитивные технологии: отечественный и зарубежный опыт, состояние и перспективы промышленного освоения в ракетно-космической промышленности, ключевые направления исследований и развития технологий».
2. Сообщение чл.-корр. РАН, г.н.с. ИФТТ РАН Михаила Ивановича Карпова, «Технология получения гранул из жаропрочных сплавов на основе тугоплавких металлов: Mo, W, Nb, Ta, основанная на газовой атомизации электродов, изготовленных методом вакуумной электронно-лучевой плавки».
3. Доклад ректора Санкт-Петербургского Государственного морского технического университета, д.т.н. Глеба Андреевича Туричина; «Теоретические основы и перспективы промышленного применения технологии прямого лазерного выращивания».
4. Доклад и.о. проректора по научно-исследовательской работе Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова, д.х.н. Светланы Юрьевны Хашировой «Полимерные материалы в аддитивных технологиях. Современное состояние и перспективы развития в Российской Федерации».
5. Сообщение д.б.н. Ивана Всеволодовича Гмошинского, ФГБУН «ФИЦ питания и биотехнологии» «Риски для здоровья человека, связанные с применением аддитивных технологий: зарубежный опыт».

а также выступления членов Совета и приглашенных

*Научный Совет по материалам и наноматериалам решил:*

1. Провести следующее заседание, посвященное аддитивным технологиям.
2. Подготовить проект паспорта заявки по полимерным аддитивным технологиям.
3. Составить объединенное, на основе проведения цикла заседаний, решение Научного совета РАН по проблеме аддитивных технологий.

\*\*\*

Третье заключительное заседание, посвященное **аддитивным технологиям и материалам для них**, прошло 19 октября 2021 г. в режимах он- и офф-лайн.

Повестка:

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

2. Доклад член-корреспондента РАН, д.ф.-м.н. Виктора Владимировича Иванова, директора Физтех-школы электроники, фотоники и молекулярной физики Московского физико-технический института (национальный исследовательский университет) «Аддитивные технологии с проектным масштабом в микронном диапазоне».

3. Сообщение д.х.н. Светланы Юрьевны Хашировой, и.о. проректора по научно-исследовательской работе Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова о проекте «Развитие отрасли аддитивных полимерных технологий в Российской Федерации на основе инновационных отечественных научных разработок» комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы»

4. Сообщение академика РАН Рудского Андрея Ивановича, ректора Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и член-корр. РАН, д.т.н. Виталия Владимира Сергеева, проректора Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого о ходе подготовки комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы».

##### 5. Дискуссия, обсуждение



На открытии заседания председатель Научного совета РАН академик **Сергей Михайлович Алдошин** сообщил, что в соответствии с решением президиума РАН на его заседаниях начинается заслушивание отчетов о работе Научных советов РАН. Начинает эту процедуру доклад о работе нашего Научного совета РАН по материалам и наноматериалам, который состоится 26 октября, подготовка к которому активно ведется.

Далее С.М. Алдошин отметил, что в Совете идет постоянная ротация его членов, мы привлекаем к работе активно сотрудничающих представителей академических институтов, учебных заведений, государственных структур, и решением президиума РАН в состав Совета введены следующие новые члены:

Дуб Алексей Владимирович, профессор, доктор технических наук, Первый заместитель генерального директора АО «Наука и инновации» Госкорпорации «Росатом»;

Люлин Сергей Владимирович, член-корреспондент РАН, заместитель президента РАН;

Оганов Артем Ромаевич, профессор РАН, доктор физико-математических наук, профессор Сколковского института науки и технологий;

Мерзликин Александр Михайлович, профессор, доктор физико-математических наук, заместитель директора Института теоретической и прикладной электродинамики РАН;

Павленко Вячеслав Иванович, профессор, доктор технических наук, заведующий кафедрой Белгородского государственного технологического университета им. В.Г. Шухова;

Хаширова Светлана Юрьевна, профессор, доктор химических наук, ио проректора Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова.



28.09.2021 № 1-1.27/46968

На № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

О подготовке предложений КНТП  
АТ

По списку  
д-р Егорову И.П.  
д-р Шербакову А.А.  
д-р Каляеву И.А.  
Санкт-Петербург, 30.09.2021

Госкорпорацией «Росатом» в лице отраслевого интегратора по аддитивным технологиям ООО «РусАТ» совместно с ФГАО ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» осуществляется подготовка по формированию предложений для разработки комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы» (далее соответственно – КНТП АТ, КНТП).

В соответствии с правилами разработки КНТП, утвержденными постановлением Правительства Российской Федерации от 19.02.2019 № 162, получено принципиальное одобрение Совета по приоритетному направлению Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации «Переход к цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создания систем обработки больших данных, машинного обучения и искусственного интеллекта» (далее – Совет, протокол от 16.04.2021 № 12).

Для вынесения на Совет в ноябре 2021 года необходимо сформировать комплексный план научных исследований (далее – КПНИ) в соответствии с требованиями приказа Минобрнауки России от 15.07.2019 № 500 «Об утверждении порядка формирования плана взаимоувязанных научных исследований и разработок научных и образовательных организаций, организаций реального сектора экономики для создания новых или выявления имеющихся перспективных (прорывных) и востребованных в экономике результатов», являющейся неотъемлемой содержательной частью КНТП.

Пропустил Вас, как основных участников продуктового направления «Аддитивные технологии» дорожной карты развития в Российской Федерации высокотехнологичной области «Технологии новых материалов и веществ», определить целесообразность участия возглавляемых Вами организаций в формировании и реализации КНТП АТ.



Переходя к повестке текущего заседания, С.М. Алдошин напомнил, что Советом проводится третье заседание, посвященное аддитивным технологиям. Эти заседания проводятся в соответствии с договоренностью с академиком И.А. Каляевым, закрепленной в решении возглавляемого им Научного совета РАН по приоритетному направлению Стратегии научно-технологического развития России «Переход к цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших данных, машинного обучения и искусственного интеллекта», о заслушивании докладов, посвященных аддитивным технологиям и материалам для них с целью отбора проектов для формируемой комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла (КНТП) «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы». Формирование предложений для разработки КНТП осуществляется Госкорпорацией «Росатом» в лице отраслевого интегратора по аддитивным технологиям ООО «РусАТ» совместно с ФГАО ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого». По итогам трех заседаний будет сформировано решение, которое, в том числе, будет направлено И.А. Каляеву.



Доклад член-корреспондента РАН, д.ф.-м.н. **Виктора Владимировича Иванова**, директора Физтех-школы электроники, фотоники и молекулярной физики Московского физико-технический института (национальный исследовательский университет) «Аддитивные технологии с проектным масштабом в микронном диапазоне» (презентация доклада приведена в приложении 11).



В своем докладе В.В. Иванов отметил, что в настоящее время высокими темпами растет мирового рынка (порядка 30% в год) развиваются аддитивные технологии для изготовления функциональных узлов и устройств с характерным проектным масштабом в микронном диапазоне размеров. В частности, в 2020 году рынок в этой сфере достиг уровня 35 млрд. долл. США. Такие изделия актуальны для беспроводной телекоммуникации (RFID, микроантенны), роботизации технологических процессов и беспилотных транспортных средств (сенсоры, МЭМС, дисплеи), в медицинских технологиях (микро-зонды и микросенсоры), в микроэлектронике (элементы и межсоединения), энергетике (тонкопленочные солнечные элементы, топливные элементы) и других социально востребованных сферах.

Аддитивными технологиями, оказалось, многократно экономичней изготавливать многие устройства в микронном диапазоне размеров (500 – 5 мкм) в сравнении с распространенными литографическими технологиями. Фактически, происходит вытеснение литографических технологий из указанного диапазона размеров. Аддитивные методы являются более производительными, дешевыми, простыми и содержат меньше стадий. Ввиду большей распространенности в сфере микроэлектроники, аддитивные технологии микронного масштаба часто называют технологиями печатной электроники. На старте развития этих технологий использовались ранее известные технологические решения, основанные на процессах струйной печати или методах трафаретной печати чернилами на основе функциональных материалов (в форме нанодисперсий или реакционных растворов), которые достигли высокого уровня развития. В настоящее время чернильные методы доставки активного материала на подложку получили широкое распространение. Наряду с ними развиваются более совершенные аддитивные методы формирования микроразмерных структур, основанные на доставке материала в форме сухих аэрозольных наночастиц, на микроразмерной лазерной фотополимеризации и других эффектах. Если на старте развития такие технологии были планарными (2D), то современные реализации аддитивных микроразмерных технологий позволяют создавать пространственные изделия, т.е. являются 3D-технологиями.

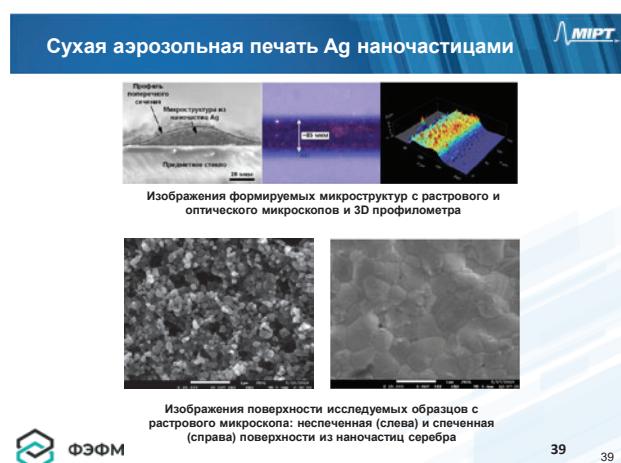
Ряд аддитивных методов формирования микро-размерных структур используются и развиваются в Московском физико-техническом институте, в том числе:

- 1) группа чернильных методов с использование коммерческих установок:
  - чернильная микроплоттерная 2D-печать, ширина линий до 5 мкм;
  - чернильная струйная 2D-печать, ширина линий до 25 мкм;

- чернильная аэрозольная 3D-печать, ширина линий до 10 мкм;
- разработка чернил на основе коллоидных растворов активных наночастиц (Pt, Ag, керамика 8YSZ и др.).

Разработаны процессы изготовления чернильной печатью ряда микро-размерных изделий: микроантенн из Ag, микронагревателей для сенсоров Pt, сенсорных матриц, тонких слоев прозрачных проводников для оптоэлектронных устройств, электролитических слоев ТОТЭ, 3D-межсоединений.

2) «сухая» аэрозольная 3D-печать без использования чернил, метод и экспериментальное оборудование разработаны в МФТИ, базирующийся на применении в качестве источника наночастиц газоразрядного генератора аэрозолей. Ширина линий до 25 мкм. Наночастицы синтезируются непосредственно перед использованием в импульсно-периодических процессах электрического разряда в проточном газе между электродами из требуемого материала. Аэрозольный поток наночастиц фокусируется и доставляется на обрабатываемую поверхность, частицы осаждаются в сухой форме без растворителя. Процессы осаждения и монолитизации структур из наночастиц осуществляются в едином технологическом цикле с использованием лазерного излучения, обеспечивающего локальное лазерное спекание массива наночастиц без перегрева подложки. Сильной стороной данного подхода является совмещение в одном устройстве трех одновременно протекающих процессов: газоразрядного получения, локальной аэрозольной доставки и локального лазерного спекания наночастиц на подложке.



Разработаны процессы изготовления сухой печатью ряда микро-размерных изделий: плазмонных микросенсоров, электродных решеток, 3D-межсоединений.

3) DLW-STED нанолитография 3D-микроструктур – метод фемтосекундной фотополимеризации с использованием специального дополнительного тушащего лазера, разрабатывается в МФТИ. В настоящее время в МФТИ функционируют две установки для 3D-нанолитографии: оригинальная (МФТИ) и коммерческая Nanoscribe Photonics Professional (Германия). Установки обеспечивают изготовление элементов пластиковой микрооптики сложных без дополнительной обработки. Системы микролинз «печатаются» за один процесс, отпадает необходимость в дополнительных сборках или юстировках. На основе систем объективов можно создавать миниатюрные мультиапертурные системы визуализации: эндоскопия, оптическое зрение дронов, оптическая метрология, системы безопасности и прочее.

Сообщение д.х.н. Светланы Юрьевны Хашировой, и.о. проректора по научно-исследовательской работе Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова о проекте «Развитие отрасли аддитивных полимерных технологий в Российской Федерации на основе инновационных отечественных научных разработок» комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла «Аддитивные

технологии. Новые материалы и технологические процессы» (презентация приведена в *приложении 12*).

С.Ю. Хаширова доложила подготовленный в соответствии с решением Научного совета РАН по материалам и наноматериалам от 29 июня 2021 г. проект КПНИ «Развитие отрасли аддитивных полимерных технологий в Российской Федерации на основе инновационных отечественных научных разработок» для включения в формируемую программу КНТП «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы», включив работы различных организаций, занимающихся аддитивными полимерными технологиями и материалами для них.

### **Аддитивные полимерные технологии – развитие в РФ**

**Ключевая цель** - повышение эффективности использования аддитивных полимерных технологий в промышленном комплексе Российской Федерации на основе инновационных отечественных научных разработок и переход к передовым цифровым технологиям в стратегических направлениях отечественной промышленности для производства конкурентных образцов техники

#### **Задачи**

✓ Создание отечественных полимерных материалов и композитов для аддитивных технологий

✓ Разработка отечественного оборудования с отечественным программным обеспечением для аддитивных технологий, моделирование свойств изделий и определение оптимальных режимов печати

15 проектов - 12 организаций  
КБГУ, СПбПУ, ЯГУ, РГУ МИРЭА, ВолгГТУ,  
ИПХФ РАН, ИВС РАН, ИНХС РАН, БИП СО РАН, ВИАМ  
АО «Композит», ООО «ВОЛТЕХНО»



Ответственный исполнитель-координатор комплексного проекта	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова
Заказчик комплексного проекта	ГК Росатом, ГК Роскосмос
Соисполнитель комплексного проекта	Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Участники комплексного проекта	<ul style="list-style-type: none"><li>– Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова (КБГУ);</li><li>– Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук (ИПХФ РАН);</li><li>– Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов (ФГУП «ВИАМ»);</li><li>– Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук (ИВС РАН);</li><li>– Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиеva Российской академии наук (ИНХС РАН);</li><li>– Акционерное общество «Композит», г. Королев (АО «Композит»);</li><li>– Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» (СПбПУ);</li><li>– Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Байкальский институт природопользования Сибирского отделения Российской академии наук (БИП СО РАН);</li></ul>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>–Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования МИРЭА-Российский технологический университет (РТУ МИРЭА);</li> <li>–Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН);</li> <li>– Государственное бюджетное учреждение здравоохранения города Москвы «Научно-исследовательский институт неотложной детской хирургии и травматологии» Департамента здравоохранения города Москвы (НИИ НДХиТ);</li> <li>–Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и техники» (Сколтех);</li> <li>–Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-исследовательский институт общей патологии и патофизиологии»(ФГБНУ «НИИОПП»);</li> <li>–Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет» (ВолгГТУ);</li> <li>– ООО «ВОЛТЕХНО», г. Волжский;</li> <li>– Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ярославский государственный технический университет» (ЯГТУ).</li> </ul>
Цель комплексного проекта	Повышение эффективности использования аддитивных технологий в промышленном комплексе Российской Федерации на основе инновационных отечественных научных разработок и переход к передовым цифровым технологиям в стратегических направлениях отечественной промышленности для производства конкурентных образцов техники.
Задачи комплексного проекта	<p><i>1. Разработка отечественных полимерных материалов и композитов на их основе для использования в аддитивных технологиях:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- разработка полимер-полимерных композиционных материалов на основе суперконструкционных полимеров для 3D печати и исследование межфазных явлений (<b>Работа 1 Эффекты межфазного взаимодействия в смесевых композитах на основе аморфных и кристаллизующихся жесткоцепных высокотермостойких термопластов для 3D печати</b>) (КБГУ, ИПХФ РАН);</li> <li>- разработка технологии получения волоконнаполненных композиционных материалов на основе полиэфиркетонов различных структур для печати методом нанесения расплавленной полимерной нити (<b>Работа 2 «Разработка отечественных высоконаполненных композиционных материалов нового поколения на основе полиэфиркетонов для 3D печати методом FDM»</b>) (КБГУ, ИПХФ РАН);</li> <li>- разработка критериев и технологии получения армированных (АрПКМ) и дисперсно-наполненных (ДНПКМ) композиционных материалов с регулируемой структурой и комплексом технологических и эксплуатационных свойств для 3D печати методом FDM (<b>Работа № 3 «Разработка критериев и технологии получения высокотехнологичных дисперсно-</b></li> </ul>

**наполненных (ДНПКМ) и армированных (АрПКМ) отечественных композиционных материалов на основе высокотермостойких полимерных матриц с регулируемой структурой и комплексом технологических и эксплуатационных свойств для 3D печати методами FDM и CFC» (РТУ МИРЭА);**

- разработка умных материалов нового поколения из класса аморфных и кристаллизующихся полимеров, а также композитов на их основе с эффектом памяти формы для использования в 3D/4D печати (**Работа 4 «Разработка аморфных и аморфно-кристаллических «интеллектуальных» материалов на основе конструкционных и суперконструкционных полимеров и получение принципиально новых фундаментальных знаний о 4D печати с их применением»**) (КБГУ).

разработка новых ароматических частично-кристаллических полиэфиримидов способных переходить в вязкотекучее состояние с целью переработки их методами 3D печати (FDM и СЛС-технологии) (**Работа 5 «Разработка высокотехнологичных полимерных и композиционных материалов на основе кристаллизуемых полиэфиримидах для их переработки методами 3D печати»**) (ИВС РАН);

- создание новых фоточувствительных композиций на основе функционализированных ароматических гетероцепных полимеров, которые могут быть использованы для формирования объемных изделий с повышенной термостойкостью и механической прочностью (**Работа 6 «Разработка фоточувствительных композиций на основе ароматических гетероцепных полимеров для УФ-технологий 3D-печати»**) (БИП СО РАН);

- создание новых фоточувствительных композиций на основе акрилатных и эпоксидных полимеризационноспособных олигомеров, в том числе модифицированных ароматическими гетероцепными полимерами, которые могут быть использованы для прецизионного формирования объемных изделий с повышенной термостойкостью и механической прочностью (**Работа 7 «Разработка фотополимеризующихся композиций для получения методом аддитивных технологий высокопрочных материалов с повышенной теплостойкостью»**) (ВолгГТУ);

- разработка технологии пропитки непрерывного волокна многокомпонентными растворами термостойких термопластов, а также модифицированными реактопластами для получения бездефектных монолитных препрегов с последующим использованием в 3D-печати (**Работа № 8 «Создание препрегов на базе армирующих нитей, пропитанных многокомпонентными связующими, для применения в 3D-печати методом послойного наплавления (FDM)»**) (ИНХС РАН);

- развитие технологии порошкового литья под давлением и 3D печати с получением металлических, керамических и полимерных изделий сложной геометрической формы (**Работа №9 «Разработка технологии порошкового литья под давлением и 3D печати с целью получения металлических, керамиче-**

	<p>ских и полимерных изделий сложной конфигурации») (ИНХС РАН).</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- синтез суперконструкционных полимеров из класса полиэфиркетонов медицинского назначения и разработка композиционных материалов на их основе для применения в 3D печати персонализированных имплантатов (<b>Работа №10 «Разработка отечественных полимерных композитов нового поколения, адаптированных для 3D печати персонализированных имплантатов для восстановления повреждений костей черепа»</b>) (КБГУ, НИИ НДХиТ, ФГБНУ «НИИОПП», Сколтех).</li> <li>- разработка плоских мембран с заданной пористостью и компактного мембранных модуля на их основе с помощью 3D печати (<b>Работа №11 «Создание полимерных мембран и компактных мембранных модулей методом 3D печати»</b>) (ИНХС РАН);</li> <li>- синтез гибридных композиционных мембран на основе ионообменных и мезопористых полимерных пленок с внедренными наночастицами или пористой матрицы для применения в водородной энергетике, системах водоочистки, обратном электродиализе и аналитической химии (<b>Работа №12 «Разработка гибридных композиционных мембран на основе полимерной матрицы для энергетики и экологии»</b>) (ИОНХ РАН).</li> </ul> <p>2. <i>Разработка отечественного оборудования для аддитивных технологий, моделирование свойств и определение оптимальных режимов печати:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- доработка опытного образца 3D принтера для вывода на рынок аддитивного оборудования мирового уровня и обеспечения технологической независимости и импортозамещения (<b>Работа 13 «Высокотемпературный 3D принтер для печати методом селективного лазерного спекания (SLS)»</b>) (КБГУ, АО «Композит»);</li> <li>- исследование метода многоуровневого моделирования механических свойств изделий из суперконструкционных полимеров и композитов на их основе, полученных методами литья под давлением и 3D печати (<b>Работа 14 «Моделирование и исследование механических свойств изделий из суперконструкционных полимеров и композитов на их основе, полученных методами литья под давлением и 3D печати»</b>) (КБГУ, СПбПУ);</li> <li>- исследование реологических характеристик, аутогезии и свариваемости потоков расплавов дисперсно-наполненных полимерных композиционных материалов (ДНПКМ) с разными типами дисперсной структуры и определение критериев для создания материалов и расчета узлов оборудования для 3D печати (<b>Работа 15 «Разработка реологических критериев и температурных условий для переработки и надежной свариваемости потоков расплавов ДНПКМ для 3D печати методом FDM и расчета отдельных узлов оборудования»</b>) (РТУ МИРЭА);</li> <li>- создание устройств, использующих технологию типа SAF (Selective Absorption Fusion — селективная абсорбционная</li> </ul>
--	---

	<p>сварка) для получения высокоточных изделий прямого назначения из отечественных высокоэффективных полимеров типа ПЭЭК и его различных фракций (ПЭЭК-порошок) (<b>Работа 16 «Устройство с цифровой программируемой термостатичной камерой для высокоточной 3D печати отечественными полимерными материалами типа PEEK, PEEK CF/GF и пр»</b>) (ООО «ВОЛТЕХНО»);</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- создание специального узла 3D принтера - головки, обеспечивающей печать порошковыми полимерными композиционными материалами по технологии АКФ (<b>Работа 17 «Разработка головки 3D принтера, обеспечивающей печать порошковыми полимерными композиционными материалами»</b>) (ЯГТУ).</li> </ul>
Обоснование необходимости проведения фундаментальных и прикладных научных исследований (обоснование их реализуемости), а также перечень соответствующих ожидаемых научных результатов, которые необходимы для успешной реализации комплексного проекта, и их характеристики, имеющиеся научные и технологические заделы, необходимые для реализации комплексного проекта или способствующие его реализации, которые будут и (или) могут быть использованы для достижения цели комплексного проекта	<p>Потребность в материалах для различных технологий 3D печати в настоящее время удовлетворяется в большей степени за счет импортного сырья. Особенно это касается наиболее перспективных высокотермостойких полимерных материалов, таких как полиэфиркетоны (ПЭЭК) которые в России не производятся. Таким образом, для выхода из стопроцентной импортозависимости в таких материалах, которые в основном используются в стратегически важных областях: медицинской, оборонной, авиационной, ракетно-космической, необходимо развитие своей сырьевой базы, в связи с чем ряд работ посвящен разработке суперконструкционных материалов для 3D печати и композиционных материалов на их основе. Также актуальным является создание отечественных 3D принтеров для печати разработанных материалов, чему также посвящены несколько проектов.</p> <p><b>Работа 1.</b> Полимер-полимерные композиты на основе высокотемпературных термопластов представляют большой практический интерес, так как благодаря смешению полимеров возможно получение нового материала, сочетающего в себе достоинства смешиваемых компонентов сравнительно простым способом. Однако для успешной реализации данной идеи необходимо решение ряда проблем, связанных с термодинамической несовместимостью большинства полимерных материалов. Исходя из этого будет проведено исследование совместимости и морфологии смесевых композитов на основе аморфных и кристаллизующихся жесткоцепных высокотермостойких термопластов; синтез компатibilизирующих добавок для несовместимых смесей на основе аморфных и кристаллизующихся жесткоцепных высокотермостойких термопластов и разработка полимер-полимерных композитов для 3D печати по результатам проведенных работ.</p> <p>Разрабатываемые полимер-полимерные композиты должны обеспечивать следующие показатели для напечатанных образцов:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- модуль упругости – не менее 2200 МПа;</li> <li>- прочность при растяжении – не менее 65;</li> <li>- ударная вязкость – не менее 50 кДж/м<sup>2</sup>.</li> </ul> <p><b>Работа 2.</b> Применение композиционных материалов на основе полиэфиркетонов в технологии 3D печати открывает новые возможности их использования и применения, однако печать методом FDM высококристаллических полиэфиркетонов и в</p>

частности наиболее широко распространенного полиэфир-эфиркетона, имеет ряд сложностей, связанных с высокой скоростью кристаллизации и нестабильностью формы и размеров печатаемого изделия

Разрабатываемые высоконаполненные композиты для аддитивных технологий будут работоспособны при длительно высоких температурах и радиационной нагрузке. Повышенная технологичность разрабатываемых композитов для использования в доступных аддитивных технологиях FDM позволит сократить временные и ресурсные затраты при изготовления сложных и легких изделий ракетно-космической техники.

Разрабатываемые волокнонаполненные композиты должны обеспечивать следующие показатели для напечатанных образцов:

- модуль упругости – не менее 10000 МПа;
- прочность при растяжении – не менее 85;
- ударная вязкость – не менее 10 кДж/м<sup>2</sup>;
- температура начала деструкции (ТГА, потеря массы 5 %) – не менее 480 °С.

**Работа 3.** Будут разработаны критерии 3D печати методом FDM армированных (АрПКМ) и дисперсно-наполненных (ДНПКМ) композиционных материалов с регулируемой структурой и комплексом технологических и эксплуатационных свойств.

**Работа 4.** Будут разрабатываться полимерные материалы с эффектом памяти формы на основе инженерных и суперконструкционных термопластичных полимеров и композитов на их основе, а также новые физические принципы работы реверсивных активных элементов на основе «умных» полимеров нового поколения и применение полученных результатов для 4D печати.

Разрабатываемые волокнонаполненные композиты должны обеспечивать следующие показатели для напечатанных образцов:

- температура начала деструкции (ТГА, потеря массы 5 %) – не менее 480 °С;
- показатель восстановления деформации – не менее 90 %;
- показатель фиксации деформации – не менее 90 %.

**Работа 5.** Проект направлен на разработку новых ароматических частично-кристаллических полиэфиримидов способных переходить в вязкотекучее состояние с целью переработки их методами 3D печати (FDM и СЛС-технологии). С целью повышения механических и эксплуатационных свойств будут получены композиты на основе синтезированных частично-кристаллических полиэфиримидов, содержащие как наноаполнители, так и армирующие волокна микронного размера. Разработка кристаллизуемых полиэфиримидов позволит получить термостойкие прочное изделия методом СЛС печати, которые традиционно считались не перерабатываемыми в трехмерные изделия по стандартной технологии (литье под давлением, экструзия и т.п.). Полученные результаты расши-

ряют представления о способах переработки кристаллизуемых полиэфиримидах и композитов на их основе для удовлетворения потребностей современной техники.

**Работа 6.** Превосходные термические и механические характеристики ароматических гетероцепных полимеров (полибензимидазолов, ароматических полиамидов, полииимидов), а также существенные трудности их переработки определяют интерес к разработке новых прогрессивных подходов к созданию объемных изделий заданной архитектоники. Этой цели могут служить аддитивные технологии, позволяющие существенно снижать затраты, повышать скорость и точность воспроизведения компьютерных моделей объектов. Представленный проект направлен на решение важной фундаментальной и прикладной проблемы: создание новых фоточувствительных композиций на основе функционализированных ароматических гетероцепных полимеров, которые могут быть использованы для формирования объемных изделий с повышенной термостойкостью и механической прочностью в результате тиол-еновой реакции, а также полимеризации акрилатных или акриламидных групп. Применение этих химических превращений, а также инновационных технологий лазерной стереолитографии и DLP 3D-печати позволит добиться высокой скорости формирования объемных изделий с разрешением до десятков микрон и высокой пространственной однородностью, что, зачастую, недостижимо при использовании других процессов и методов. Все это позволит существенно упростить процесс формирования изделий сложной геометрической формы по сравнению с традиционными весьма трудоемкими и энергозатратными методами.

**Работа 7.** Фотополимеризующиеся композиции (ФПК) в настоящее время широко востребованы для аддитивных, полиграфических и планарных (производство печатных плат) технологий, в оптоэлектронике, стоматологии, ювелирной и сувенирной промышленности, в качестве УФ-отверждаемых покрытий. Одним из трендов современной медицины является создание из ФПК полимерных имплантатов для костной пластики (скаффолд-технология). Представленный проект направлен на решение важной фундаментальной и прикладной задачи: создание новых фоточувствительных композиций на основе акрилатных и эпоксидных полимеризационноспособных олигомеров, в том числе модифицированных ароматическими гетероцепными полимерами, которые могут быть использованы для прецизионного формирования объемных изделий с повышенной термостойкостью и механической прочностью. Применение разработанных ФПК, а также инновационных технологий 3D-печати посредством лазерной стереолитографии, DLP и LED-DLP печати методом цифровой светодиодной проекции позволяет добиться высокой точности печати с вертикальным разрешением до 30 мкм. В зависимости от рецептурного состава показатели разрывной прочности материалов находятся в пределах 50 – 85 МПа; твердости по Шор D 87 – 92 усл. единиц, деформационной теплостойкости (метод HDT) 110 – 137 °С.

**Работа 8.** Разработка технологии пропитки непрерывного волокна многокомпонентными растворами термостойких термопластов, а также модифицированными реактопластами для получения бездефектных монолитных препрегов с последующим использованием в 3D-печати.

**Работа 9.** Развитие технологии порошкового литья под давлением и 3D печати с получением металлических, керамических и полимерных изделий сложной геометрической формы.

**Работа 10.** Проект направлен на отработку методики синтеза и очистки полиэфиликетона для использования в хирургии и имплантации и разработка композиционных материалов на их основе для применения в 3D печати персонализированных имплантатов, а также на моделирование механического поведения полимерных имплантатов при интеграции с нативной костной тканью.

**Работа 11.** С помощью 3D печати будут получены мембранные на основе полиметилпентена плоского типа с асимметрией пористой структуры вдоль поверхности мембранные и компактные мембранные модули на их основе.

**Работа 12.** В результате выполненных работ будут разработаны аддитивные технологии получения гибридных мембран различного типа для использования в мембранных технологиях очистки, газоразделения, производства энергии, а также в аналитической химии. Полученные материалы будут исследованы в режиме работы топливных элементов и/или систем обратного электродиализа, а также в потенциометрических сенсорах для одновременного определения неорганических и органических катионов в водных средах.

**Работа 13.** 3D печать методом лазерного спекания в качестве сырья использует полимерные порошки. От свойств порошков (формы частиц, их размеров, гладкости поверхности) зависит качество печати и механические свойства, получаемых изделий. Таким образом, необходимо проведение исследований особенностей процесса формирования частиц полимера в процессе синтеза и изучение влияния различныхnanoструктур на поверхность частиц, для разработки новых модифицированных полимерных порошков на основе полиэфиликетонов для печати ответственных изделий повышенной сложности.

Разрабатываемая технология синтеза и модификации частиц ПЭЭК должна обеспечить следующие показатели:

- температура плавления – не менее 330 °C;
- средний размер частиц – не менее 30 мкм;
- насыпная плотность – не менее 0,3 г/см<sup>3</sup>
- температура начала деструкции (ТГА, потеря массы 5 %) – не менее 450 °C.

Разрабатываемый 3D принтер должен обеспечивать следующие показатели:

- подогрев рабочего стола: до 400 °C с точностью ±5 °C за время <50 минут;
- скорость перемещения разравнивателя: от 10 мм/мин до 12000 мм/мин;
- газовый CO<sub>2</sub> лазер: длина волны 10,6 мкм, макси-

	<p>мальная средняя мощность 80 Вт;</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- температура камеры – не менее 350 °C;</li> <li>- габаритные размеры рабочей зоны: 500 × 500 × 300 мм, с возможностью уменьшения размеров рабочей зоны в направлении поперек хода;</li> <li>- максимальная скорость сканирования: 2,4 м/сек.</li> </ul> <p><b>Работа 14.</b> Большинство используемых на сегодняшний день подходов к моделированию свойств композиционных материалов не учитывает их структуру, которая является одним из основных факторов, определяющим их свойства. Использование метода многоуровневого моделирования микроструктуры как самого композиционного материала, так и изделия, полученного печатью с различными ориентациями растров и степени межрастрового соединения, позволит прогнозировать свойства напечатанных изделий с учетом их структуры.</p> <p><b>Работа 15.</b> Будут исследованы реологические характеристики, аутогезия и свариваемость потоков расплавов дисперсно-наполненных полимерных композиционных материалов (ДНПКМ) с разными типами дисперской структуры и определение критериев для создания материалов и расчета узлов оборудования для 3D печати.</p> <p><b>Работа 16.</b> Проект направлен на создание отечественных устройств, использующих технологию типа SAF (Selective Absorption Fusion — селективная абсорбционная сварка) для получения высокоточных изделий прямого назначения из отечественных высокоэффективных полимеров типа ПЭЭК и его различных фракций (ПЭЭК-порошок).</p> <p><b>Работа 17.</b> Проект направлен на разработку специального узла 3D принтера - головки, обеспечивающей печать порошковыми полимерными композиционными материалами по технологии АКФ. Исходное сырье для печати – порошковый полимерный композиционный материал (например – PET). Это позволит существенно снизить себестоимость печати за счет ухода от использования классического филамента. Печатающая головка сможет быть установлена практически на любой 3D принтер и обеспечит стабильно высокое качество печати.</p>
--	---

Далее от имени академика РАН Рудского Андрея Ивановича, ректора Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и от себя сделал он-лайн сообщение член-корр. РАН, д.т.н. **Виталий Владимирович Сергеев**, проректор Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого о ходе подготовки комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы».

### Дискуссия и обсуждение

В дискуссии и обсуждении докладов приняли активное участие члены Совета и приглашенные. С вопросами и замечаниями, предложениями в проект решения выступали академики С.М. Алдошин, Л.И. Леонтьев, Н.З. Ляхов, чл.-корреспонденты РАН М.И. Альмов, В.Г. Куличихин, С.В. Люлин, И.В. Мелихов, профессора Э.Р. Бадамшина, В.Н. Санин, Колобов Ю.Р., приглашенные – П.А. Кузнецов, А.В. Панфилов, А.Д. Таланцев.

## **Решение Совета:**

*Заслушав и обсудив доклады:*

- Доклад член-корреспондента РАН, д.ф.-м.н. Виктора Владимировича Иванова, директора Физтех-школы электроники, фотоники и молекулярной физики Московского физико-технический института (национальный исследовательский университет) «Аддитивные технологии с проектным масштабом в микронном диапазоне».
- Сообщение д.х.н. Светланы Юрьевны Хашировой, и.о. проректора по научно-исследовательской работе Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова о проекте «Развитие отрасли аддитивных полимерных технологий в Российской Федерации на основе инновационных отечественных научных разработок» комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы».
- Сообщение академика РАН Рудского Андрея Ивановича, ректора Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого и член-корр. РАН, д.т.н. Виталия Владимировича Сергеева, проректора Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого о ходе подготовки комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы», а также выступления членов Совета и приглашенных

*Научный Совет по материалам и наноматериалам решил:*

1. По итогам заседания внести необходимые коррективы в объединенное решение Научного совета РАН по проблеме аддитивных технологий, которое будет являться Аналитической запиской, рассыпляемой в РАН, органы государственной власти, крупные государственные и негосударственные профильные объединения.
2. Ученому секретарю Совета организовать сбор проектов КПНИ для формируемой комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла «Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы» и выслать их от имени и с поддержкой Совета в ООО «РусАТ» Госкорпорации «Росатом» и в Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

\*\*\*

В соответствии с решением президиума РАН от 18 мая 2021 г. по итогам заседания по теме «О состоянии и перспективах развития квантовых технологий в Российской Федерации» состоялось совместное заседание Научного совета РАН «Квантовые технологии» и Научного совета РАН по материалам и наноматериалам 17 ноября 2021 г. В заседании приняли участие 55 членов Научного совета РАН «Квантовые технологии» и Научного совета РАН по материалам и наноматериалам, а также 95 приглашенных ученых и специалистов – всего 150 человек из 90 организаций и их подразделений..

**Повестка заседания:**

1. Открытие заседания. Академик РАН Красников Геннадий Яковлевич, академик РАН Алдошин Сергей Михайлович.
2. Доклад академика РАН Устинова Владимира Васильевича (ИФМ УрО РАН) «Магнитные наноструктуры для квантовой спинtronики».
3. Доклад профессора РАН, д.ф.-м.н. Калачёв Алексей Алексеевич (ФИЦ КазНЦ РАН) «Кристаллы, активированные ионами редкоземельных металлов, как перспективные материалы для квантовой памяти».
4. Доклад профессора РАН, д.ф.-м.н. Моргунова Романа Борисовича (ИПХФ РАН) «Взаимодействие Дзялошинского-Мория в спиновой орбитронике».
5. Доклад д.х.н. Буланова Андрея Дмитриевича (ИХВВ РАН) «Изотопно и химически чистые элементы. Получение, свойства, применение для квантовых технологий».

6. Доклад д.х.н. Щербакова Игоря Николаевича (ЮФУ) «Управление магнитной анизотропией комплексов гекса- и гептакоординированного Co(II) с полидентатными лигандами для получения SIM».
7. Доклад член-корр. РАН Двуреченского Анатолия Васильевича (ИФП СО РАН; Новосибирский государственный университет) «Методы управления функциональными характеристиками компонент нанофотоники на основе гетероструктур с квантовыми точками Ge/Si».
8. Доклад член-корр. РАН Никитова Сергея Аполлоновича (ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН) «Магноника – основа квантовых когерентных систем. Материалы и физические свойства».
9. Доклад профессора РАН, д.х.н. Кискина Михаила Александровича, академика РАН Ерёменко Игоря Леонидовича (ИОНХ РАН) «Карбоксилатные комплексы кобальта(II) – платформа для модификации магнитных свойств молекулярных магнитов».
10. Доклад д.ф.-м.н. Палия Андрея Владимировича (ИПХФ РАН), академика РАН Алдошина Сергея Михайловича (Научный совет РАН по материалам и наноматериалам; ИПХФ РАН), д.ф.-м.н. Цукерблата Бориса Самойловича (ИПХФ РАН) «Квантовые клеточные автоматы на основе молекулярных ячеек: от молекулярной электроники к молекулярной спинtronике».
11. Доклад онлайн член-корр. РАН Колачевского Николая Николаевича (ФИАН) «Лазерные структуры и брэгговские зеркала для квантовых вычислителей».
12. Доклад профессора РАН, д.ф.-м.н. Федина Матвя Владимировича, академик РАН Сагдеева Ренада Зиннуровича (МТЦ СО РАН) «Спины электронов и ядер для квантовых вычислений с использованием методов магнитного резонанса».
13. Доклад д.ф.-м.н. Бугрова Владислава Евгеньевича (Университет ИТМО). Полупроводниковые квантовые точки, диски, микростолбики и нитевидные структуры для задач квантовой сенсорики, обработки и передачи информации.

Во вступительном слове при открытии заседания председатель Научного совета РАН «Квантовые технологии», академик РАН Г.Я. Красников сообщил, что идея проведения совместного заседания двух Советов принадлежит председателю Научного совета РАН по материалам и наноматериалам, академику РАН С.М. Алдошину и была озвучена им на заседании президиума РАН 18 мая 2021 г. по теме «О состоянии и перспективах развития квантовых технологий в Российской Федерации». Основная цель – создание информационной площадки для совместной работы двух Советов и понимания ландшафта исследований в области материалов, наноматериалов, химии, а также квантовых вычислений, сенсоров и передачи данных. В составы этих Советов входят члены Отделения математических наук РАН, Отделения физических наук РАН, Отделения химии и наук о материалах, ОНИТ РАН и др., что позволяет компетентно решать широкий спектр вопросов, в основе которых лежит управление квантовым состоянием объекта, а также касающихся проблемы материалов для квантовых технологий.



Председатель Научного совета РАН по материалам и наноматериалам, академик РАН С.М. Алдошин сообщил, что на заседаниях возглавляемого им Совета принята практика

заслушивания и обсуждения докладов с последующей подготовкой аналитического отчета и его рассылкой в заинтересованные отделения РАН и органы исполнительной власти, руководству РАН и в Правительство РФ с целью получения обратной связи. Материалы представляемых от Совета докладов на текущем и последующих совместных заседаниях охватывают вопросы перехода от молекулярного магнетизма (одномолекулярные, одиночные и одноцепочечные магниты – SMMs, SIMs и SCMs, спин-кроссовер, фотопреключаемые молекулярные магниты и т.д.) и металлической спинtronики (спиновые вентили, спинвентильные платформы для сенсоров нано- и микрочастиц и т.д.) к молекулярной спинtronике (на основе молекулярных материалов: гибридные системы, сочетающие спин-кроссовер и проводимость и т.д.; мономолекулярная спинtronика: SMMs, мономолекулярные магнитоэлектрики и т.д.) и квантовому компьютерингу (SMMs и SIMs как спиновые кубиты, спиновые кластеры с запутанными состояниями и большими временами когерентности и т.д.). Синтез новых материалов является итерационным процессом, включающим этапы экспериментальной характеризации, теоретического моделирования и разработки критериев рационального дизайна.

Академик-секретарь Отделения химии и наук о материалах РАН, академик РАН М.П. Егоров выразил уверенность в том, что объединение усилий химиков, направленно разрабатывающих новые материалы, и физиков, имеющих компетенции в их обработке и практическом применении, приведет к созданию качественно новых приборов и устройств для квантовых технологий.



Академик РАН В.В. Устинов (ИФМ УрО РАН) представил краткий обзор традиционных и новейших ветвей квантовой наноспинtronики. Классификация ветвей спинtronики дана с привязкой к материалам, на основе которых строится элементная база приборов и устройств спинtronики.



Описаны основные типы магнитных наногетероструктур «металлической» спинtronики, отдельные слои которых построены из проводящих ферромагнитных, антиферро-

магнитных, ферримагнитных и гелимагнитных материалов. Дан анализ состояния дел по развитию фундаментальных и технологических исследований, а также практическому применению магнитных наногетероструктур как основы элементной базы металлической спинtronики в России и за рубежом.

В своем докладе профессор РАН, д.ф.-м.н. А.А. Калачёв (ФИЦ КазНЦ РАН) сообщил, что в возглавляемой им организации ведутся работы в части создания устройств квантовой памяти на базе кристаллов, активированных ионами редкоземельных металлов. С формальной точки зрения устройства квантовой памяти представляют собой управляемые линии задержки для квантовых состояний электромагнитного поля. Основное применение таких устройств – синхронизация случайных процессов, происходящих в квантовых схемах.



В перспективе такие устройства смогут обеспечить генерацию многофотонных состояний на основе генераторов однофотонных состояний в случайные моменты времени для оптических квантовых вычислений. А в ближайшее время на основе устройств квантовой памяти ожидается реализация синхронизации распределения перепутанности в квантовых повторителях для протяжённых линий квантовой связи. В качестве носителей информации могут выступать кубиты (в этом случае квантовую информацию об одном фотоне хранят одиночные атомы, для записи множества состояний требуется использовать квантовый регистр) или атомные ансамбли (позволяют записывать информацию о пространственно-временной структуре световых полей, в т.ч. орбитальный момент световых пучков, и о больших последовательностях квантовых состояний света). Наиболее актуальные физические подходы к реализации – градиентное фотонное эхо, атомные частотные гребёнки, электромагнитно-индукционной прозрачности и нерезонансное рамановское поглощение и испускание фотонов. Среди перечисленных принципов наибольшая эффективность (вероятность воспроизведения квантового состояния, хранимого в течение некоторого минимального промежутка времени в устройстве квантовой памяти), равная 92%, достигнута в режиме электромагнитно-индукционной прозрачности на холодных атомах. В то же время наибольшее время хранения, составляющее порядка 1 часа, достигнуто на кристаллах, активированных ионами редкоземельных металлов, что делает их наиболее перспективными материалами для оптической квантовой памяти. При поддержке РНФ выполняется целый ряд инициативных проектов, связанных с исследованием примесных кристаллов для квантовой памяти по таким направлениям, как синтез силикатов (ИОФ РАН), фторидов (КФУ), ЭПР спектроскопия (Казанский физико-технический институт ФИЦ КазНЦ РАН), широкополосная оптическая спектроскопия (ИСАН), проведение экспериментов по квантовой памяти с использованием кристаллов, выращенных в отечественных и зарубежных исследовательских центрах (ИПФ РАН, Казанский квантовый центр КНИТУ-КАИ). Для достижения максимальных значений эффективности и времени хранения информации требуются высококачественные моноизотопные кристаллы. Кроме того, для проведения исследований примесных кристаллов методами оптической и ЭПР спектроскопии при температурах ниже 1 К возникает

потребность в развитии технологии создания тонких кристаллических пластин и плёнок толщиной порядка 100 мкм.

Профессор РАН, д.ф.-м.н. Р.Б. Моргунов (ИПХФ РАН) доложил об исследовании влияния взаимодействия Дзялошинского – Мория (DMI) на динамику перемагничивания синтетических ферримагнетиков с перпендикулярной анизотропией Pt/Co/Ir/Co/Pt (презентация доклада приведена в *приложении 13*). Наблюдается нетривиальная инвертированная зависимость скорости двойной доменной стенки от магнитного поля в плоскости пленки и от перпендикулярного магнитного поля.

Конкуренция вкладов DMI, приводящая к появлению эффективного поля разного знака в двух слоях Со, вызывает немонотонную зависимость скорости двойной доменной стенки от поля, приложенного в плоскости образца. В дополнение к локальному влиянию DMI на асимметричный рост домена, обнаружено макроскопическое проявление DMI в виде перемагничивания, ускоренного приложенным магнитным полем в плоскости пленки.



Ускорение магнитной релаксации обеспечивается за счет индуцированной DMI эллиптичности зародышей намагниченности и соответствующего увеличения частоты их контактов по сравнению с круглыми зародышами в отсутствие поля в плоскости образца. Полученные результаты важны для устройств спин-орбитроники, где перемагничивание двухслойных структур, разделенных тяжелым металлом, контролируется спин-орбитальным взаимодействием.

В своем докладе д.х.н. А.Д. Буланов (ИХВВ РАН) рассказал, что в представляющей им организации ведутся работы по исследованию изотопно и химически чистых элементов.



Среди известных химических элементов 22 являются моноизотопными, остальные представляют собой смесь от 2 до 10 стабильных изотопов. Основным методом разделения изотопов является центробежное разделение, которое реализуется на предприятиях Росатома.

Наиболее чистые образцы получены для таких элементов, как Si и Ge. До 2018 года одной из ключевых сфер применения Si-28 был проект «АВОГАДРО» по уточнению постоянной Авогадро и создание на базе его нового эталона массы (проекты «Килограмм-2», «Килограмм-3»). В ходе работы по данным проектам при участии ИХВВ РАН были выращены 6 стержней поликристаллического кремния-28, каждый массой более 6 кг, удовлетворяющие требованиям по содержанию примесей углерода на уровне  $2 \times 10^{15}$  ат./см<sup>3</sup>. Моноизотопные материалы, полученные в ИХВВ РАН, применялись в работах по проведению нейтронного трансмутационного легирования, созданию изотопно модифицированных оптических волокон, нанопроволок, кремниевых вакансационных (SiV-) цветных центров в алмазе. Среди современных областей применения выделяется использование моноизотопных Si и Ge как одной из перспективных физических платформ для квантового компьютера. Для получения моноизотопных разновидностей Si и Ge как материалов для полупроводникового кубита в ИХВВ РАН доступны гидрид кремния-28 с обогащением более 99,99 % ат., гидриды кремния-29 и 30, моногерманы с обогащением более 99,9 % ат. ИХВВ РАН поставил такие материалы для использования в реализации концепций одноэлектронного транзистора (с требованием «полупроводникового вакуума» на уровне 10<sup>-3</sup>% по содержанию спинового изотопа Si-29 в бесспиновой матрице Si-28) и квантовых ям на гетероструктурах Si-28/SiGe. В ИХВВ РАН разработаны технологии получения как газофазных (гидриды моноизотопных Si и Ge), так и твердофазных (моноокристаллы) прекурсоров с высокой химической и изотопной чистотой для выращивания изотопных гетероструктур. Перед ИХВВ РАН стоят задачи по получению моноизотопных разновидностей Si и Ge с более высокой изотопной чистотой и более низким содержанием спиновых изотопов, а также по совершенствованию методик глубокой очистки и достижению более высокой степени чистоты моноизотопных Si и Ge по электрически активным примесям.

Д.х.н. И.Н. Щербаков (ЮФУ) доложил о развитии исследований в области моноионных магнетиков (SIM – single ion magnets) на основе комплексных соединений Co(II) с полидентатными органическими лигандами, которые являются привлекательной платформой для изучения корреляций «структура – тип и величина магнитной анизотропии», «структура – механизм магнитной релаксации» как благодаря богатой координационной химии, так и возможности весьма точного квантово-химического расчета параметров магнитной анизотропии и параметров релаксационных процессов при использовании волновой функции CASPT2(NEVPT2) с учетом спин-орбитального взаимодействия в рамках квазивырожденной теории возмущений – QDPT. В докладе (презентация приведена в *приложении 14*) приведен краткий обзор SIM и механизмов процессов релаксации намагниченности в соединениях Co(II).



Предложены основы дизайна координационного окружения для максимизации магнитной анизотропии в соединениях гекса- и гептакоординированного Co(II). Рассмотрены

магнитные свойства полученных соединений, проявляющих свойства SIM, в переменном и постоянном внешнем поле, обсуждается тонкая настройка анизотропных параметров и параметров механизмов релаксации намагниченности за счет варьирования структуры полидентатных лигандов.

Начиная доклад, член-корр. РАН А.В. Двуреченский (ИФП СО РАН; Новосибирский государственный университет) доложил о предложенном и реализованном подходе, позволяющем многократно увеличить квантовую эффективность кремниевых фотодетекторов и излучателей света (фотолюминесценция) с квантовыми точками Ge в ИК диапазоне. Основу подхода составляет использование фотонных ловушек или фотонных кристаллов (ФК), помещенных в активную область детекторов. Такими ловушками служили субвольновые периодические решетки отверстий на поверхности полупроводника с периодом, сравнимым с длиной волны оптического излучения. Для падающей волны такая структура является дифракционной решеткой и способна поддерживать три основных моды: фундаментальную моду, волноводную и канализирующую. Для электромагнитной волны, падающей по нормали к поверхности двумерного ФК, фундаментальная мода соответствует нулевому порядку дифракции и имеет нулевую компоненту волнового вектора в плоскости ФК. Волноводная и канализирующая моды различаются областью локализации излучения, они возникают в первом дифракционном порядке и имеют отличную от нуля планарную компоненту волнового вектора. Возбуждение именно этих мод должно усиливать оптическое поглощение в слоях КТ, поскольку они распространяются вдоль слоев КТ, тем самым увеличивая длину оптического пути.



Обнаружено, что максимальное усиление чувствительности детектора в ближней ИК области спектра за счет ФК достигается для решетки отверстий с периодом 1700 нм и диаметром 1130 нм. Такие гетероструктуры демонстрируют 25-ти кратное увеличение фототока на длине волны 1,2 мкм и 34-х кратное увеличение фототока на длине волны 1,6 мкм по сравнению с образцами без массива фотонных ловушек.

Показано, что встраивание массива упорядоченных одиночных и групп Ge(Si) островков в фотонные кристаллы приводит к увеличению интенсивности их сигнала фотолюминесценции при температуре жидкого азота. При этом наибольший рост интенсивности (до 30 раз) наблюдается для упорядоченного массива одиночных Ge(Si) островков. Рост интенсивности связывается с взаимодействием излучения островков с радиационными модами фотонного кристалла, которое более эффективно осуществляется для массива одиночных островков. В результате сигнал люминесценции от одиночных упорядоченных островков Ge(Si), встроенных в фотонные кристаллы, наблюдается вплоть до комнатной температуры.

Математическое моделирование пространственных распределений электромагнитного поля и вектора Пойтинга в исследуемых структурах показало, что в фотодетекторах с фотонными ловушками поток энергии направлен из отверстий в слой Ge/Si, что приводит к возбуждению планарных волноводных мод, сосредоточенных в области квантовых точек. Поскольку поперечный размер устройств намного больше толщины слоев с КТ, детекторы с ловушками фотонов обладают повышенной квантовой эффективностью.

Член-корр. РАН С.А. Никитов (ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН) рассказал, что в возглавляемой им организации ведутся работы в области магноники (спинtronики диэлектриков, то есть немагнитных материалов, в которых носителями заряда являются магноны), в частности, квантовой когерентности систем с ферромагнитными материалами.



На основе магнонов в антиферромагнетиках представляется возможным реализовать платформу квантовых вычислений, которая выгодно отличается возможностью работы при комнатной температуре и с излучением терагерцового диапазона. На текущий момент работы в области магноники находятся на уровне физических исследований. В них участвуют российские вузы (МГУ имени М.В. Ломоносова, НИТУ «МИСиС», Университет ИТМО, МФТИ, Казанский федеральный университет и СГУ), РКЦ и институты РАН (ФИАН, ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ИФТТ РАН, ИРЭ им. Котельникова РАН, ИФМ УрО РАН). В текущем году ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН принял участие в подготовке трёх дорожных карт по магнонике, орбитронике и квантовым вычислениям.

Профессор РАН, д.х.н. М.А. Кискин (ИОНХ РАН) начал доклад (презентация приведена в *приложении 15*) с напоминания, что магнитное поведение соединений с парамагнитными ионами металла определяется координационным окружением, кристаллическим полем лигантов, характером взаимодействий с соседними парамагнитными центрами. Особую роль при поиске новых молекулярных магнитов играют соединения с ионами кобальта(II), поскольку их свойства обусловлены наличием спин-орбитального взаимодействия, источника магнитной анизотропии. Анизотропия иона металла возникает из-за расщепления в нулевом поле (ZFS) и является причиной проявления свойств мономолекулярного/моноионного магнита (SMM/SIM).

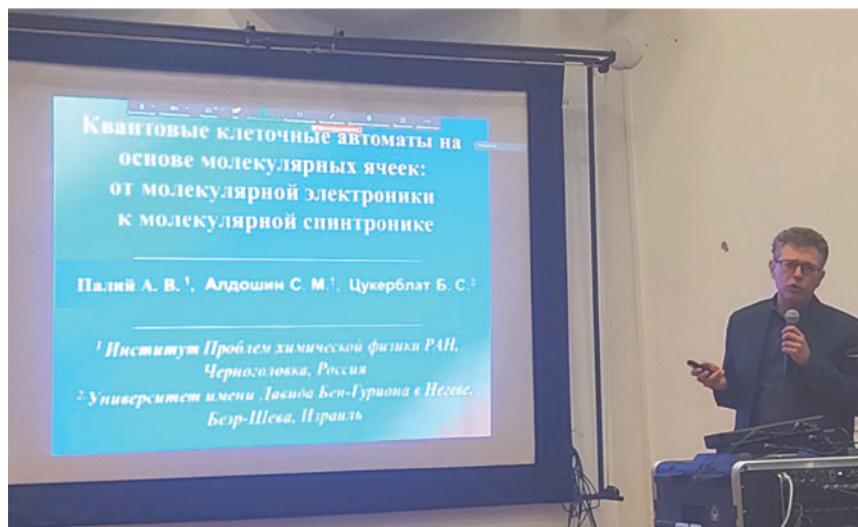
Геометрия ближайшего окружения иона металла обуславливает его электронное строение и определяет знак и значение аксиального параметра ZFS ( $D$ ,  $\text{см}^{-1}$ ). В зависимости от знака  $D$  различают два типа магнитной анизотропии: аксиальная для отрицательного  $D$  и планарная для положительного  $D$ . Отрицательные значения  $D$  предпочтительны для об-

разования энергетического барьера между двумя состояниями с  $S = \pm 3/2$  и медленной релаксацией намагниченности.



Особенностью карбоксилатных комплексов является возможность управления геометрией координационного окружения иона металла, упаковкой молекул в кристалле, что делает их удобными и перспективными соединениями для создания новых молекулярных магнитов. В данной работе на примере нескольких разновидностей карбоксилатных комплексов кобальта(II) изучено влияние различных подходов (влияние выбора лиганда, обменные взаимодействия, магнитное разбавление) на характер магнитной анизотропии ионов и магнитных свойств.

В своем докладе д.ф.-м.н. А.В. Палий дал краткий обзор нового направления исследований в области молекулярной электроники, относящегося к созданию и теоретическому моделированию молекулярных квантовых клеточных автоматов (МККА) и работах, проводимых в ИПХФ РАН по этому направлению (презентация доклада приведена в *приложении 16*).



В качестве молекулярных ячеек предлагается использовать тетрамерные квадратно-плоскостные кластеры смешанной валентности (СВ). Устройства на основе таких ячеек можно рассматривать как альтернативу устройствам, создаваемым на основе полупроводниковых КМОП – технологий. Преимуществами устройств на основе молекулярных ККА

являются их меньшие размеры и более низкое энергопотребление, обусловленное отсутствием тока в этих устройствах. В докладе приведены примеры молекул СВ, пригодных в качестве ячеек. Продемонстрирована выявленная в недавних работах ключевая роль вибронного взаимодействия, приводящего к эффекту автолокализации электронной пары и, как следствие, к усилению поляризуемости ячейки.

Также показано, что в молекулярных ячейках, в котором «лишние» электроны делокализованы по парамагнитным остовам существенную роль играют спиновые эффекты, что делает эти системы перспективными для создания устройств молекулярной спинtronики. В частности, при определенных условиях электростатическое поле управляющей ячейки приводит к спиновому переключению в рабочей ячейке, что важно для создания полифункциональных устройств, сочетающих в себе функции ККА-устройств с функциями молекулярных спиновых переключателей.

Член-корр. РАН Н.Н. Колачевский (ФИАН) сообщил, что в возглавляемой им организации ведутся работы в области применения лазерных систем для реализации квантовых вычислителей и сенсоров.



Представлен обзор лидирующих решений в области квантовых вычислений с использованием лазерных технологий на ионах (IonQ, AQT, Honeywell) и нейтральных атомах. В рамках работ лидирующего исследовательского центра РКЦ-ФИАН за 2021 г. собран квантовый вычислитель на пяти кубитах (ионы Yb<sup>+</sup>), реализованы одно- и двухкубитные операции. Отмечено, что для выполнения операций с ионами (охлаждение ионов или считывания квантовых состояний) в ходе работы квантового компьютера необходимо работать в ближнем ультрафиолетовом диапазоне (около 360 нм), что свидетельствует о необходимости разработки соответствующих полупроводниковых лазерных излучателей. Кроме того, для адресации оптических кубитов (ширина перехода менее 1 Гц) нужны узкоспектральные лазеры. Аналогичный запрос на лазерные системы существует и в области стандартов частоты, которые разрабатываются в ФИАН согласно программе развития ГЛОНАСС и дорожной карте по квантовым сенсорам: в состав приборов входят ультрафиолетовые лазеры для охлаждения ионов и часовой лазер. Для создания ультрастабильных лазеров с узким спектром (отношение ширины спектра к частоте лазера порядка 10-15) требуется создание брэгговских отражателей с коэффициентом отражения более 99,99.

Профессор РАН, д.ф.-м.н. М.В. Федин (МТЦ СО РАН) отметил, что реализация квантовых вычислений и квантовой обработки информации критическим образом зависит от наличия кубитов с оптимальными свойствами и эффективных методов манипулирования ими (презентация приведена в *приложении 17*).



Спины электронов и ядер являются одним из наиболее перспективных типов кубитов, управление которыми возможно с применением методов магнитного резонанса (ЯМР и ЭПР). Более того, возможность создания неравновесных (гиперполяризованных) спиновых состояний является перспективной как для повышения экспериментальной чувствительности при реализации квантовых вычислений, так и для эффективной инициализации кубитов. В докладе обсуждалось несколько актуальных направлений развития исследований в данной области, и были приведены примеры работ, проводимых в МТЦ СО РАН. С точки зрения методологии, развиты подходы создания и использования долгоживущих ядерных спиновых состояний, а также различные подходы генерации спиновой гиперполяризации. В направлении оптимизации свойств электронных спиновых кубитов, предложен новый тип многофункциональных платформ для реализации квантовых вычислений при комнатных температурах, основанный на стабильных триазинильных радикалах в мезопористых кремниевых материалах.

Д.ф.-м.н. В.Е. Бугров (Университет ИТМО) сообщил, что в представляемой им организации ведутся работы по созданию лавинных детекторов одиночных фотонов на основе материалов InGaAs (слой поглощения) / InP (область умножения).



В ходе апробации классического подхода использования диффузии Zn в InP в атмосфере H<sub>2</sub> с последующим отжигом выявлены типичные для такого метода диффузии проблемы качества поверхности. Данный аспект послужил поводом к освоению технологии создания структур в ходе диффузии Zn в InP в процессе MOCVD, который характеризуется хорошей воспроизводимостью и высокой однородностью по поверхности. Кроме

того, осуществляется переход с InP на InAlAs в качестве материала области умножения, который обеспечит более высокую температурную стабильность напряжения пробоя, низкие шумы при работе в линейном режиме, а также возможность создания матричных приёмников с меньшим шагом. В перспективе возможно создание массивов микростолбиков, с помощью которых станет возможным реализация квантовых сенсоров со сверхвысоким пространственным разрешением на основе детектирования N-запутанных фотонов.

## Дискуссия и обсуждение

В дискуссии и обсуждении докладов приняли активное участие члены Совета и приглашенные. С вопросами и замечаниями, предложениями в проект решения выступали: академик РАН Г.Я. Красников; академик РАН С.М. Алдошин; академик РАН А.А. Горбацевич; академик РАН М.П. Егоров; академик РАН Р.А. Сурис; академик РАН В.В. Устинов; иностранный член РАН, академик НАН Беларуси С.Я. Килин; член-корр. РАН Е.С. Горнев; член-корр. РАН А.В. Двуреченский; член-корр. РАН Н.Н. Колачевский; член-корр. РАН С.А. Никитов; член-корр. РАН В.Ф. Разумов; профессор РАН, д.ф.-м.н. А.А. Калачёв; профессор РАН, д.х.н. М.А. Кискин; профессор РАН, д.ф.-м.н. Р.Б. Моргунов; профессор РАН, д.ф.-м.н. М.В. Федин; д.ф.-м.н. В.Е. Бугров; д.х.н. А.Д. Буланов; д.ф.-м.н. В.И. Волков; д.ф.-м.н. А.К. Звездин; д.ф.-м.н. А.М. Мерзлиkin; д.ф.-м.н. С.А. Моисеев; д.ф.-м.н. А.В. Палий; д.ф.-м.н. Э.Б. Фельдман; д.ф.-м.н. А.А. Фраерман; д.ф.-м.н. М.А. Черепнев; д.х.н. И.Н. Щербаков; д.х.н. Э.Б. Ягубский; к.ф.-м.н. В.В. Вьюрков; к.ф.-м.н. В.В. Семашко.

1. При подведении итогов заседания председатель Научного совета РАН по материалам и наноматериалам, академик РАН С.М. Алдошин выразил уверенность в консолидации усилий ученых и специалистов двух Советов, а также сообщил о готовности докладов для очередного совместного заседания двух Советов. Заместитель председателя Научного совета РАН «Квантовые технологии», академик А.А. Горбацевич также подтвердил готовность Совета к проведению очередного совместного заседания сообщил, что совокупное финансирование квантовых технологий в нашей стране – сотни миллионов долларов. Приняты до 2024 г. и реализуются две дорожные карты – по квантовым вычислениям и квантовым коммуникациям, запланировано их продление на 2025 – 2030 гг., при этом РАН выступает в качестве экспертизного органа. Достигнуты результаты на уровне и выше мирового. В связи с этим, работы в области квантовых технологий весьма перспективны.

## РЕШИЛИ:

1. Принять к сведению полученную в ходе заседания информацию.
2. Рекомендовать предоставить материалы докладов для публикации в ежеквартальном бюллетене Научного совета РАН «Квантовые технологии».
3. Во исполнение п. 4.5 постановления президиума РАН от 18 мая 2021 г. № 79 «О состоянии и перспективах развития квантовых технологий в Российской Федерации», а именно: «4. Поручить Научному совету РАН «Квантовые технологии» (председатель – академик РАН Красников Г.Я.) до 15 октября 2021 г.:» «4.5 совместно с Научным советом РАН по материалам и наноматериалам (председатель – академик РАН Алдошин С.М.) проанализировать состояние фундаментальных исследований в Российской Федерации в области разработки материалов для квантовых технологий и представить предложения руководству РАН» сформулировать предложения руководству РАН следующим образом:

В России работы в области полупроводниковых квантовых точек, дисков, микростолбиков и нитевидных структур для задач квантовой сенсорики, обработки и передачи информации ведутся в ряде организаций: ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ИФП СО РАН, Алферов-

ском университете, Университете ИТМО, НИУ ВШЭ и др. Наибольшие успехи достигнуты в разработке материалов для однофотонных излучателей (ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Университет ИТМО, Алферовский университет) и лавинных детекторов одиночных фотонов на основе материалов InGaAs/InP (Университет ИТМО, ИФП СО РАН). В случае с ДОФ исследования уже переведены в стадию прикладных разработок первого поколения детекторов.

Также представляет большой интерес развитие направления КМОП-совместимых материалов, таких как hydex (high-refractive-index doped silica) и Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, как платформы для квантовой интегральной фотоники, в том числе квантовых генераторов случайных чисел, генераторов оптических частных гребенок для квантовых оптических вычислений, фотонного машинного обучения. В мире экспериментальные работы в этой области ведутся последние 10 лет, в РФ с 2017 г. появляются высокоуровневые совместные работы с международными экспериментальными группами. Представляется своевременным начать серьёзные экспериментальные работы в этом направлении в РФ.

Молекулярные квантовые клеточные автоматы (ККА) основаны на квадратных ячейках, каждая из которых построена из четырех квантовых точек и двух дополнительных электронов. С помощью распределения зарядов в ячейке кодируется бинарная информация, а передача информации осуществляется благодаря кулоновскому взаимодействию. На основе таких ячеек возможно создание различных электронных устройств молекулярной электроники, имеющих преимущества по сравнению с традиционной электронной компонентной базой по размерам и энергопотреблению. В США, Китае, Канаде, Италии, Франции, Израиле, Индии ведется широкий спектр исследований и разработок в указанной области: (1) химический дизайн молекулярных ячеек на основе органических и неорганических комплексов смешанной валентности, создание сеточных молекулярных структур, (2) квантово-химическое исследование молекулярных ячеек, разработка теоретических подходов, объединяющих квантово-химический анализ с полуфеменологическими моделями, (3) изучение механизмов диссипации энергии, экспериментальные исследования процессов диссипации вnanoэлектронных устройствах, (4) разработка логических устройств на основе ККА. В России разработка теоретических подходов и моделей для описания свойств ККА и кванто-химический дизайн молекулярных ячеек ведется только в ИПХФ РАН.

В России достигнуты значительные успехи в развитии подходов использования спиновых состояний и спиновых кубитов в связке с методами магнитного резонанса для задач квантовых вычислений. В частности, в МТЦ СО РАН (г. Новосибирск) развиты подходы создания и использования долгоживущих ядерных спиновых состояний, а также различные подходы генерации спиновой гиперполяризации. Предложен новый тип многофункциональных кубитов на основе электронных спиновых состояний стабильных триазинильных радикалов для реализации квантовых вычислений при комнатных температурах.

В результате проведения совместного заседания Советов РЕШИЛИ:

– продолжить работы в области фундаментальных основ спиновых технологий и направленного конструирования «умных» полифункциональных материалов для спинtronики и молекулярной электроники, финансируемые Минобрнауки России в рамках крупного научного проекта с 2020 г. и выполняемые консорциумом ИПХФ РАН, ИОНХ РАН, МТЦ СО РАН, ИФХЭ РАН, ЮФУ, путем организации альянса на базе указанных организаций и включения в него новых профильных отечественных и зарубежных организаций;

– организовать сбор предложений от ИХВВ РАН и других заинтересованных организаций по формированию программы производства особо- и сверхчистых материалов, перечень и объем которых востребован отечественной микроэлектронной промышленностью;

– разработать программу «Метаматериалы для управления функциональными характеристиками компонентов nanoэлектроники, нанофотоники и спинtronики».

Метаматериал – композиционный материал, свойства которого обусловлены не столько свойствами составляющих его элементов, сколько искусственно созданной периодической структурой. Они представляют собой искусственно сформированные и особым образом структурированные среды, обладающие электромагнитными или акустическими свойствами, сложно достижимыми технологически, либо не встречающимися в природе.

Под такими свойствами следует понимать особые значения физических параметров среды, например, отрицательные по величине значения как диэлектрической  $\epsilon$ , так и магнитной  $\mu$  проницаемостей, пространственную структуризацию (локализацию) распределения величин этих параметров (в частности, периодическое изменение коэффициента преломления как у фотонных кристаллов), наличие возможности управления параметрами среды в результате внешних воздействий (метаматериалы с электрически управляемой диэлектрической и магнитной проницаемостями). Приставка «мета-» переводится с греческого как «вне», что позволяет трактовать термин «метаматериалы» как структуры, чьи эффективные электромагнитные свойства выходят за пределы свойств образующих их компонентов. Метаматериалы синтезируются внедрением в исходный природный материал различных периодических структур с самыми разными геометрическими формами, которые модифицируют диэлектрическую и магнитную восприимчивости исходного материала. Разработчик метаматериалов при их синтезировании имеет возможность выбора (варьирования) различных свободных параметров (размеры структур, форма, постоянный и переменный период между ними и т.д.).

---

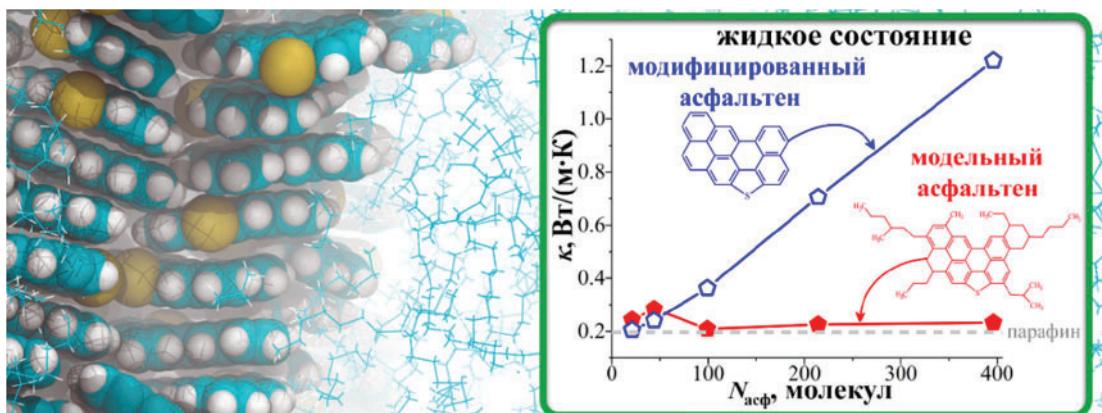
**РЕЗУЛЬТАТЫ,  
ПОЛУЧЕННЫЕ в 2021 г.  
ПО НАПРАВЛЕНИЮ РАБОТЫ  
НАУЧНОГО СОВЕТА РАН  
ПО МАТЕРИАЛАМ  
И НАНОМАТЕРИАЛАМ**

---

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ ДЛЯ ТЕПЛОАККУМУЛЯТОРОВ И СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ

С.В. Люлин, А.Д. Глова, С.В. Ларин  
Институт высокомолекулярных соединений РАН

На основе результатов полноатомного компьютерного моделирования продемонстрирована возможность использования асфальтенов (побочных продуктов переработки нефти) в качестве недорогих функциональных наполнителей в материалах для теплоаккумуляторных [1-4] и солнечных [5] батарей. Предложенные способы модификации молекул асфальтенов для их использования в качестве углеродного нанонаполнителя, улучшающего теплопроводящие свойства парафин-содержащих тепловых аккумуляторов, [1-4] нашли экспериментальное подтверждение [6]. Проведение предложенной модификации приводит к повышению ароматичности молекул асфальтенов, что позволяет их рассматривать как аналоги так называемых «техногенных» асфальтенов, получаемых из тяжелой смолы пиролиза. Выполненные исследования составляют фундаментальную основу для создания недорогих теплоаккумуляторов нового поколения, при использовании которых может быть значительно уменьшена нагрузка на окружающую среду от загрязнения отходами переработки углеводородов и существенно повышенна эффективность использования тепловых энергетических ресурсов.



**Рис. 1.** Мгновенная конфигурация теплоаккумулирующей системы на основе фазопереходных материалов (парафинов), наполненных модельными молекулами асфальтенов [4]. Сферами показаны молекулы модифицированных асфальтенов, линиями - молекулы парафина.

На вставке справа показана зависимость коэффициента теплопроводности  $\kappa$  от числа  $N_{\text{асф}}$  молекул асфальтенов при наличии или при отсутствии (модифицированные асфальтены) боковых алифатических групп в системах на основе парафина.

1. A.D. Glova, I.V. Volgin, V.M. Nazarychev, S.V. Larin, S.V. Lyulin, A.A. Gurtovenko / Toward realistic computer modeling of paraffin-based composite materials: critical assessment of atomic-scale models of paraffins // RSC Advances (IF = 3.361), 2019, 9, 38834.
2. A.D. Glova, S.V. Larin, V.M. Nazarychev, J.M. Kenny, A.V. Lyulin, S.V. Lyulin / Toward Predictive Molecular Dynamics Simulations of Asphaltenes in Toluene and Heptane // ACS Omega, 2019, 4, 20005.
3. V.M. Nazarychev, A.D. Glova, I.V. Volgin, S.V. Larin, A.V. Lyulin, S.V. Lyulin, A.A. Gurtovenko / Evaluation of thermal conductivity of organic phase-change materials from equilibrium and non-equilibrium computer simulations: Paraffin as a test case // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 165, 120639.
4. A.D. Glova, V.M. Nazarychev, S.V. Larin, A.V. Lyulin, S.V. Lyulin, A.A. Gurtovenko / Asphaltenes as novel thermal conductivity enhancers for liquid paraffin: Insight from in silico modeling // Journal of Molecular Liquids, 2022, 346, 117112.

5. N.I. Borzdun, R.R. Ramazanov, A.D. Glova, S.V. Larin, S.V. Lyulin / Model Carboxyl-Containing Asphaltenes as Potential Acceptor Materials for Bulk Heterojunction Solar Cells. // Energy & Fuels, 2021, 35(9), 8423– 8429.

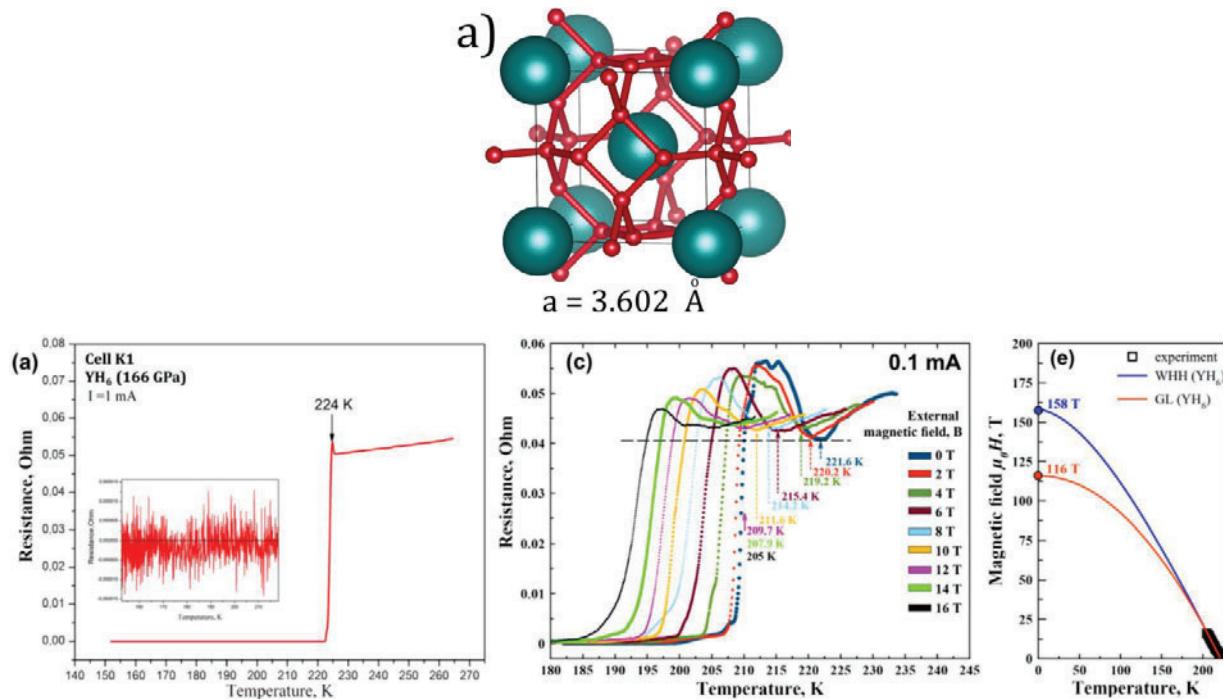
6. V.V. Makarova, S.N. Gorbacheva, A.V. Kostyuk, S.V. Antonov, Yu.Yu. Borisova, D.N. Borisov, M.R. Yakubov / Composites based on neat and modified asphaltenes and paraffin: Structure, rheology and heat conductivity // Journal of Energy Storage, 2022, in press <https://doi.org/10.1016/j.est.2021.103595>

## СУПЕРГИДРИДЫ, СОДЕРЖАЩИЕ АНОМАЛЬНОЕ КОЛИЧЕСТВО ВОДОРОДА. РЕКОРДНЫЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ СВЕРХПРОВОДНИКИ

А.Р. Оганов с сотр.

*Сколковский институт науки и технологий (Сколтех)*

Совместно с коллегами из Института Кристаллографии РАН, ФИАН, и Цзилиньского Университета (Китай) были открыты и изучены (теоретически и экспериментально) уникальные соединения, образующиеся при высоких давлениях – супергидриды, содержащие аномальное количество водорода. Среди них – рекордные высокотемпературные сверхпроводники, такие, как открытые нами  $(La,Y)H_{10}$  ( $T_c = 253$  K),  $(La,Y)H_6$  ( $T_c=237$  K),  $YH_6$  ( $T_c = 224$  K),  $CeH_9$  и  $CeH_{10}$  ( $T_c$  до 115 K). Результаты опубликованы в престижнейших научных журналах.



Содалитоподобная структура  $YH_6$  и экспериментальные результаты по ее сверхпроводимости

1. Semenok D.V., Troyan I.A., Ivanova A.G., Kvashnin A.G., Kruglov I.A., Hanfland M., Sadakov A.V., Sobolevskiy O.A., Pervakov K.S., Lyubutin I.S., Glazyrin K.V., Giordano N., Karimov D.N., Vasiliev A.L., Akashi R., Pudalov V.M., Oganov A.R. (2021). Superconductivity at 253 K in lanthanum–yttrium ternary hydrides. Materials Today 48, 18–28.
2. Chen W., Semenok D.V., Huang X., Shu H., Li X., Duan D., Cui T., Oganov A.R. (2021). High-Temperature Superconducting Phases in Cerium Superhydride with a  $T_c$  up to 115 K below a Pressure of 1 Megabar. Phys. Rev. Lett. 127, 117001.

3. Troyan I.A., Semenok D.V., Kvashnin A.G., Sadakov A.V., Sobolevskiy O.A., Pudalov V.M., Ivanova A.G., Prakapenka V.B., Greenberg E., Gavrilyuk A.G., Lyubutin I.S., Struzhkin V.V., Bergara A., Errea I., Bianco R., Calandra M., Mauri F., Monacelli L., Akashi R., Oganov A.R. (2021). Anomalous high-temperature superconductivity in YH<sub>6</sub>. Advanced Materials, 2006832

## НОВАЯ ШКАЛА ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЕЙ

**А.Р. Оганов с сотр.**  
**Сколковский институт науки и технологий (Сколтех)**

Было пересмотрено ключевое понятие химии – электроотрицательность, и создана новая шкала электроотрицательностей. Наша шкала гораздо точнее описывает и предсказывает энергию химических связей, чем шкала Полинга. Мы планируем распространить ее на случай высоких давлений.

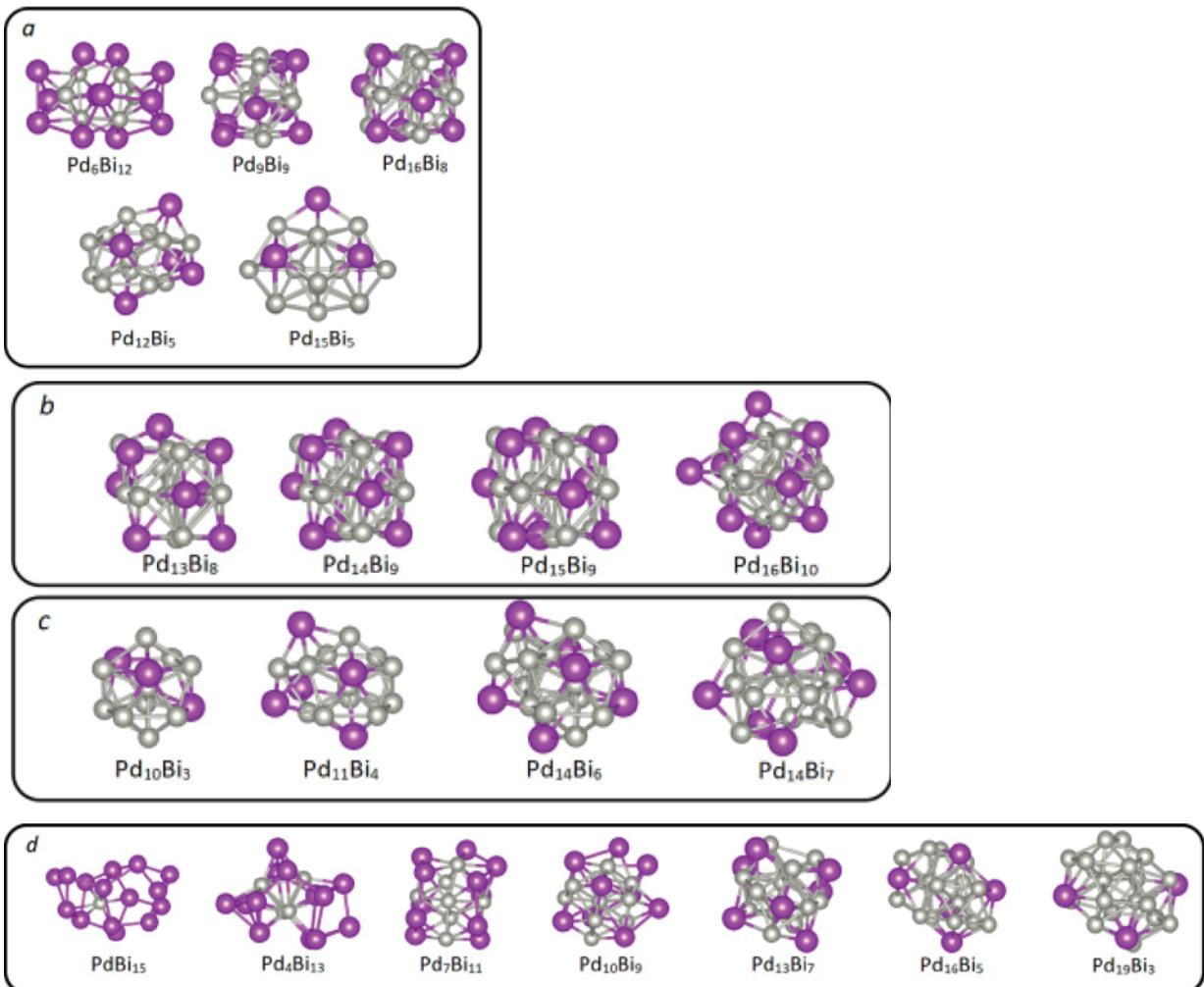
1. H	2. Be	3. Mg	4. Ca	5. Sr	6. Ba	7. Ra	8. Y	9. Zr	10. Nb	11. Mo	12. Tc	13. Ru	14. Rh	15. Pd	16. Ag	17. Cd	18. In	19. Sn	20. Sb	21. Te	22. I	23. Xe							
2.17	2.42	2.39	2.20	2.13	2.02	2.15	2.52	2.05	2.59	2.47	2.12	2.82	2.68	2.70	2.88	2.36	2.29	2.68	3.05	3.14	3.20	3.12							
3.04		2.15	2.07	2.07	1.97	2.35	2.35	2.23	2.08	2.12	2.20	2.82	2.65	2.70	2.88	2.36	2.29	2.68	3.05	3.14	3.20	3.12							
4. Na	5. V	6. Cr	7. Mn	8. Fe	9. Co	10. Ni	11. Cu	12. Zn	13. Ga	14. Ge	15. As	16. Se	17. Br	18. Kr	19. Ga	20. Ge	21. As	22. Se	23. Br	24. Kr	25. I	26. Xe							
2.15	2.39	2.08	2.20	2.32	2.34	2.32	2.86	2.26	2.43	2.79	3.15	3.16	3.44	3.57	2.43	2.79	3.15	3.37	3.45	3.57	3.20	3.12							
5. K	6. Sc	7. Ti	8. Cr	9. Mn	10. Fe	11. Co	12. Ni	13. Cu	14. Zn	15. Ga	16. Ge	17. As	18. Se	19. Br	20. Kr	21. Ga	22. Ge	23. As	24. Se	25. Br	26. Kr	27. I							
2.07	2.35	2.23	2.08	2.12	2.32	2.34	2.32	2.86	2.26	2.43	2.79	3.15	3.37	3.45	3.57	2.43	2.79	3.15	3.37	3.45	3.57	3.20	3.12						
6. Ca	7. Sc	8. Ti	9. Cr	10. Mn	11. Fe	12. Co	13. Ni	14. Cu	15. Zn	16. Ga	17. Ge	18. As	19. Se	20. Br	21. Kr	22. Ga	23. Ge	24. As	25. Se	26. Br	27. Kr	28. I	29. Xe						
2.20	2.20	2.08	2.12	2.20	2.32	2.34	2.32	2.86	2.26	2.43	2.79	3.15	3.37	3.45	3.57	2.43	2.79	3.15	3.37	3.45	3.57	3.20	3.12						
7. Rb	8. Sr	9. Y	10. Zr	11. Nb	12. Mo	13. Tc	14. Ru	15. Rh	16. Pd	17. Ag	18. Cd	19. In	20. Sn	21. Sb	22. Te	23. I	24. Xe	25. Sb	26. Te	27. I	28. Xe	29. I	30. Xe						
2.07	2.13	2.52	2.05	2.59	2.47	2.82	2.68	2.65	2.70	2.88	2.36	2.29	2.68	3.05	3.14	3.20	3.12	2.68	3.05	3.14	3.20	3.12	3.12						
8. Cs	9. Ba	10. Hf	11. Ta	12. W	13. Re	14. Os	15. Ir	16. Pt	17. Au	18. Hg	19. Tl	20. Pb	21. Bi	22. Po	23. At	24. Rn	25. Cs	26. Ba	27. Hf	28. Ta	29. W	30. Re	31. Os	32. Ir					
1.97	2.02	2.01	2.32	2.42	2.59	2.47	2.72	2.79	2.98	2.81	2.92	2.26	2.69	2.85	3.04	3.04	1.97	2.02	2.01	2.32	2.42	2.59	2.47	2.72					
9. Fr	10. Ra	11. Rf	12. Db	13. Sg	14. Bh	15. Hs	16. Mt	17. Ds	18. Rg	19. Cn	20. Nh	21. Fl	22. Mc	23. Lv	24. Ts	25. Og	26. Fr	27. Ra	28. Rf	29. Db	30. Sg	31. Bh	32. Hs	33. Mt					
2.01	2.15	2.27	2.38	2.51	2.48	2.52	2.66	2.73	2.83	3.03	2.49	2.57	2.21	2.42	2.61	2.59	2.59	2.15	2.27	2.38	2.51	2.48	2.52	2.66	2.73				
10. La	11. Ce	12. Pr	13. Nd	14. Pm	15. Sm	16. Eu	17. Gd	18. Tb	19. Dy	20. Ho	21. Er	22. Tm	23. Yb	24. Lu	25. Ac	26. Th	27. Pa	28. U	29. Np	30. Pu	31. Am	32. Cm	33. Bk	34. Cf	35. Es	36. Fm	37. Md	38. No	39. Lr
2.49	2.61	2.24	2.11	2.24	1.90	1.81	2.40	2.29	2.07	2.12	2.02	2.03	1.78	2.68	2.22	2.62	2.33	2.45	2.35	2.22	2.28	2.31	2.08	2.18	2.29	2.38	2.47	2.06	2.10

Tantardini C., Oganov A.R. (2021). Thermochemical electronegativities of the elements. Nature Communications 12, 2087.

## СТАБИЛЬНЫЕ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ НАНОЧАСТИЦЫ РД-ВИ

**А.Р. Оганов с сотр.**  
**Сколковский институт науки и технологий (Сколтех)**

Совместно с экспериментаторами из Томского Государственного Университета, мы предсказали стабильные биметаллические наночастицы Рд-Ви и их катализическую активность. Мы сумели понять строение этих наночастиц и их наблюдаемую катализическую активность в реакции окисления глюкозы – а также ее максимум для соотношения Рд : Ви = 75 : 25.



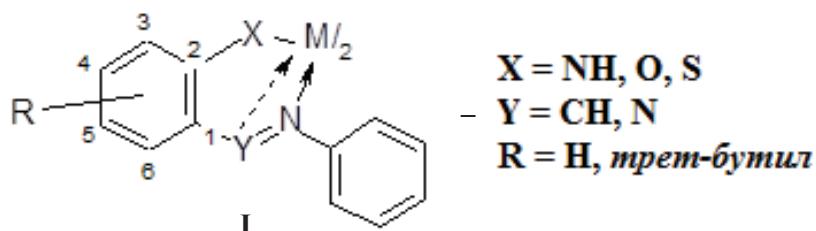
Sandu M.P., Kovtunov M.A., Baturin V.S., Kurzina I., Oganov A.R. (2021). Influence of Pd:Bi ratio on Pd-Bi/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts: structure, surface and activity in glucose oxidation. Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 14889-14897.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ НЕОБЫЧНОЙ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ 3D МЕТАЛЛОВ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ.

С.М. Алдошин, К.В. Боженко, А.Н. Утенышев, В.В. Ткачев, Л.Г. Гуцев

*Институт проблем химической физики РАН*

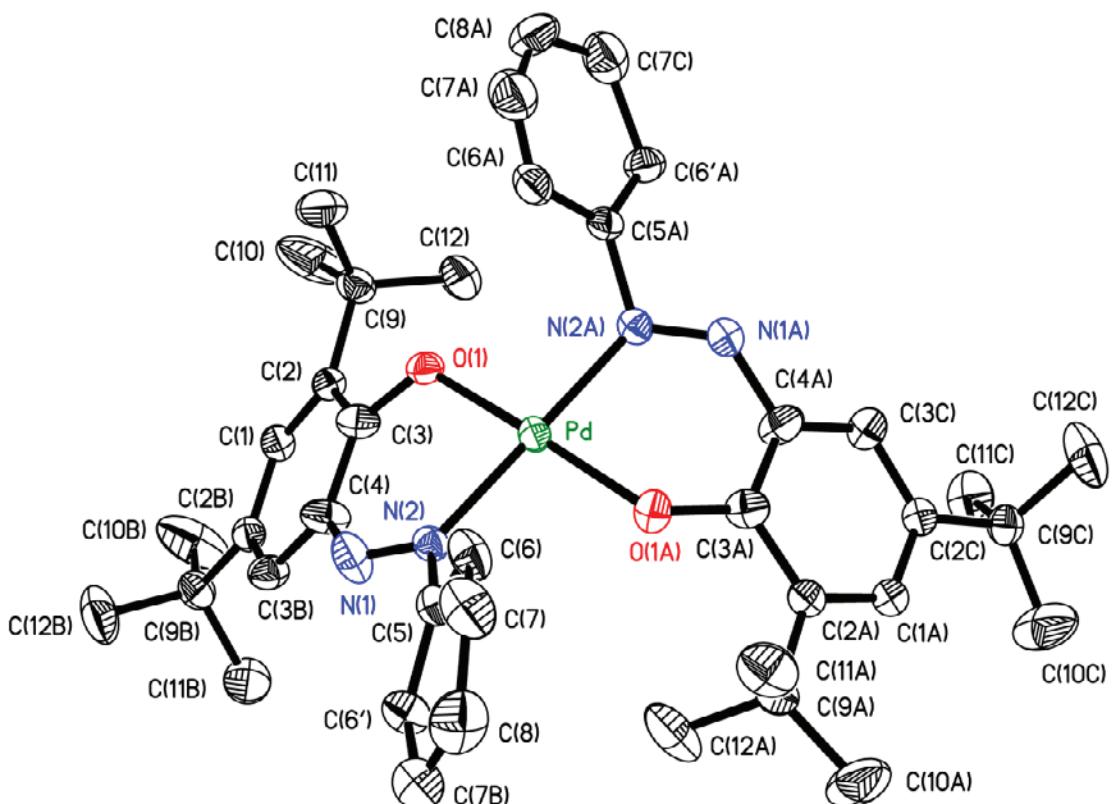
Для комплексных соединений на основе производных азобензола типа I ( $Y=N$ ) возможно образование необычных изомеров, что является следствием амбидентного характера азо-группы. Ранее было показано, что оба азота проявляют примерно равную донорную активность, и поэтому оба атома азота участвуют в координации с металлом в равной степени.



В дальнейших исследованиях методом РСА было показано, что для соединения типа I в кристаллической фазе реализуются структуры в виде 5-ти и 6-ти членных циклов. Общий вид комплекса I (без атомов водорода) показан на рисунке 1. В связи с этим проведен синтез и РСА нового комплекса 3,5-дипрет-бутил-2-оксиазобензола с палладием и никелем и установлена необычная конформация обоих комплексов в виде купола, вершину которого образует транс-плоский координационный узел. В приближении TPSSh/def2tzvp (Pd,Ni)/6-311G\*(C,N,O,H) выполнены расчеты модельных соединений, полученных заменной фенильного заместителя при атоме N(2) на атом водорода, метил, этил и третбутил. Показано, что координационный узел комплексов с Pd и Ni имеет плоско-квадратное строение только когда при атоме азота N(2) находится атом водорода. По мере увеличения заместителя при атоме N(2) наблюдается увеличение «купольности» комплексов. Таким образом, показано, что можно управлять купольностью таких комплексов. Затем нами выполнены квантово-химические расчеты в газовой фазе аналогичных модельных комплексов на основе Cu(II), Mn(II), Co(II), Fe(II), Cr(II), Zn(II) для низкоспинового и высокоспинового состояний в том же приближении.

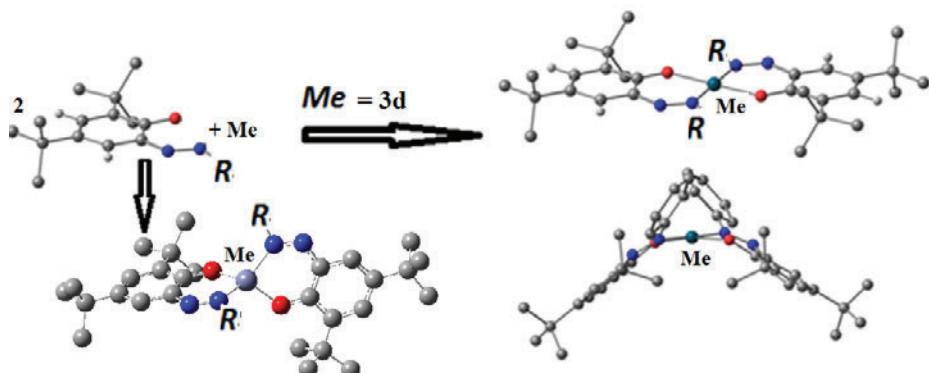
Показано, что комплексы атомов металлов с заполненной (Zn), наполовину заполненной оболочкой (Cr) и наполовину заполненной d-подоболочкой (Mn) имеют в газовой фазе в основном энергетическом состоянии тетраэдрическую структуру, тогда как комплексы на основе металлов Cu(II), Co(II) и Fe(II) имеют в основном энергетическом состоянии необычную куполообразную структуру.

При увеличении объема заместителя увеличивается «купольность» комплексов. Найдено, что при переходе от газовой фазы к кристаллической фазе комплексы на основе металлов Cu(II), Co(II) и Fe(II) изменяют необычную куполообразную структуру. Тогда как комплексы на основе металлов (Mn) (II), Cr(II) и Zn(II) остаются тетраэдрическими.



**Рис. 1.** Общий вид комплекса I (без атомов водорода) полученный из РСА. Термальные эллипсоиды с вероятностью 50%

Схематическая иллюстрация полученного результата показана на рисунке 2.



**Рис. 2.** Схематическая иллюстрация полученного результата

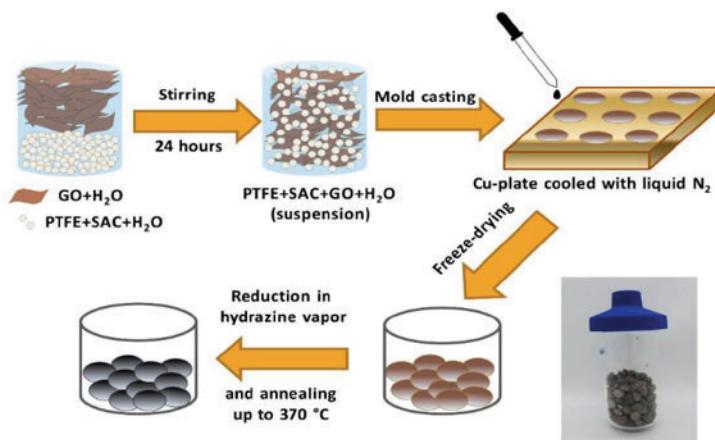
1. В.В. Ткачев, К.В. Боженко, А.Н. Утенышев, С.М. Алдошин, Л.Г. Гуцев. Удивительный пример сохранения необычной куполообразной структуры 3,5-ди-(трет-бутил)-2-оксиазобензола Pd<sup>II</sup> в кристалле и газовой фазе // Известия Академии Наук, серия химическая 2021, №5, с. 847-856.
2. С.М. Алдошин, К.В. Боженко, А.Н. Утенышев, В.В. Ткачев. Квантово-химическое изучение необычной структуры комплексов 3d металлов в газовой фазе // Известия АН, сер. хим., 2021, №12, с. 2324-2331.

## НОВАЯ МЕТОДИКА ПОЛУЧЕНИЯ ГРАНУЛИРОВАННОГО ГИДРОФОБНОГО АЭРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ ПОЛИТЕТРАФОРЭТИЛЕНА И ОКСИДА ГРАФЕНА

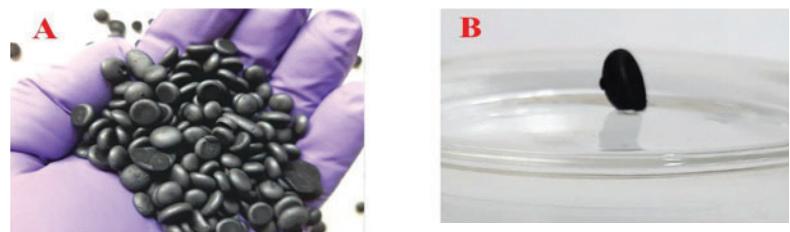
**С.А. Баскаков, Ю.В. Баскакова, Е.Н. Кабачков, Н.Н. Дремова, Ю.М. Шульга**  
*Институт проблем химической физики РАН*

Разработана усовершенствованная методика приготовления гранул аэрогеля политетрафорэтилен-оксид графена (ПТФЭ-ГО) состава 50:50 (мас.-%). Удельная плотность полученных гранул составляет  $29 \pm 2 \text{ мг}/\text{см}^3$ . Гранулы испытаны в качестве пригодного для повторного использования сорбента для изопропилового спирта (ИПС) в циклах сорбция/сжигание. Установлено, что сорбционная способность аэрогеля по ИПС увеличивается с 35,6 до 39,3 г/г в результате выгорания спирта. Показано также, что удельная поверхность ПТФЭ -ВОГ увеличивается с 26 до  $49 \text{ м}^2/\text{г}$  при циклировании.

Суть метода заключается в том, что смесь суспензий ПТФЭ и ГО наносили с помощью шприца-дозатора на медную пластину, которую предварительно охлаждали жидким азотом. Этот способ замораживания капель предотвращает растрескивание гранул, которое происходит, если капли замораживаются в жидком азоте. После сублимационной сушки плотность полученных гранул составила  $35 \pm 2 \text{ мг}/\text{см}^3$ .



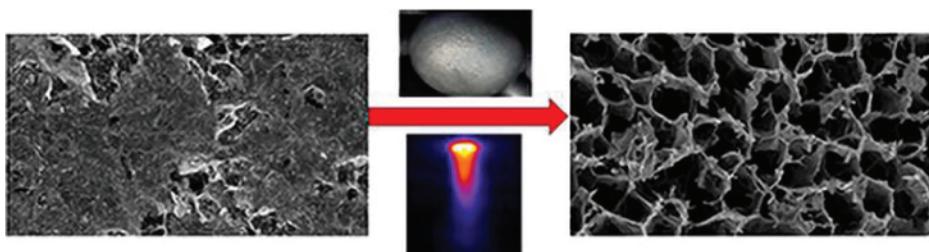
Последующая обработка парами гидразина проводит к восстановлению оксида графена (ВОГ) в композитном аэрогеле. После восстановления цвет аэрогеля изменился с серого на черный.



Гранулы аэрогеля PTFE-GO после восстановления

Гранула аэрогеля PTFE-rGO на поверхности воды

Далее аэрогель отжигался в трубчатой кварцевой печи в токе аргона. Образец сначала нагревали до  $T = 120^{\circ}\text{C}$  и выдерживали при этой температуре 20 мин для удаления остаточного гидразина и воды.



После этого температура отжига была увеличена до  $370^{\circ}\text{C}$ , и образец был отожжен в течение 30 мин при этой температуре. Удельная плотность гранул после восстановления парами гидразина и отжига при  $370^{\circ}\text{C}$  снизилась до  $29 \pm 2 \text{ мг}/\text{см}^3$ .

Полученные гранулы были испытаны в качестве пригодного для повторного использования сорбента для изопропилового спирта (ИПС) в циклах сорбция/сжигание. Показано, что сорбционная способность аэрогеля по ИПС увеличивается с 35,6 до 39,3 г/г в результате выгорания спирта. Во время горения ИПС температура отдельной гранулы может превышать  $300^{\circ}\text{C}$ . Мелкопористая структура приповерхностного слоя гранулы разрушается во время горения спирта, обнажается внутренняя структура с более крупными порами, и относительная доля ПТФЭ на поверхности гранул уменьшается. Также было показано, что удельная поверхность ПТФЭ -ВОГ увеличивается с 26 до  $49 \text{ м}^2/\text{г}$  при циклизации.

Baskakov S.A., Baskakova Y.V., Kabachkov E.N., Dremova N.N., Shulga Y.M., Gutsev G.L. Langmuir, 2021, 37, 10233 10240

## РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ МИКРО- И МЕЗОПОРИСТЫХ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА, ГРАФЕНОПОДОБНЫХ ПРОДУКТОВ, РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОТХОДОВ

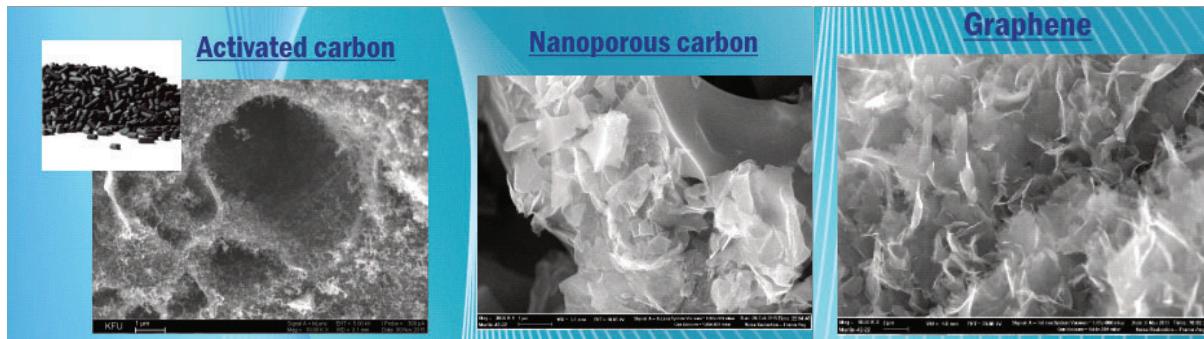
**А.Г. Ткачев с сотр.**  
*Тамбовский государственный технический университет*

Важнейшим результатом прошедшего года является разработка технологии получения микро- и мезопористых наноструктурированных углеродных материалов (на основе графена, графеноподобных продуктов, растительного сырья и технологических отходов) нового поколения для создания: прорывных инновационных материалов в области хране-

ния и транспортировки энергии; очистки гидросистем от токсичных и радиоактивных элементов; подготовки чистой воды.

Полученные сорбенты позволяют улучшить качество очистки водных сред от поллютантов различной химической природы: органика – более чем в 11 раз; неорганика (тяжелые металлы) – 2–40 раз.

## Высокоэффективные материалы тонкой очистки жидкостей



Адсорбция тяжелых металлов из водных растворов (свинецPb<sup>2+</sup>)

Адсорбция органических веществ из водных растворов (метиловый оранжевый)

Материалы	Адсорбционная емкость, мг/г	Материалы	Адсорбционная емкость, мг/г
Активированный уголь	6	Активированный уголь	120
Глина	11	Активированный уголь + нанотрубки	218
Мезопористый углерод	13	Мезопористый углерод	<b>1315</b>
Углеродные нанотрубки	<b>22</b>	Углеродные нанотрубки	1081
Суспензия графена	<b>458</b>	TiO <sub>2</sub>	7,5
Водная паста многослойного графена	104	TiO <sub>2</sub> + нанотрубки	151
Водная паста малослойного графена	38		

Разработанный высокопористый электродный материал на основе микро- и мезопористогоnanostructured углерода позволяет получить симметричные суперконденсаторы с характеристиками, превышающими результат мировых производителей на 20–30%:



Удельная мощность и энергия разработанных СК находятся в интервалах 30÷36 кВт/кг и 25÷27.4 Вт ч/кг соответственно. Подтверждена температурная стабильность СК при температуре -40°C, теплостойчивость образцов с электролитом на основе ацетонитрила при температуре +65°C.

Новый углеродный материал (NCM-R) был получен путем щелочной активации смеси карбонизированного оксида графена и декстрина. NCM-R имеет исключительно вы-

сокую удельную поверхность по БЭТ ( $S_{БЭТ} = 3270 \text{ м}^2/\text{г}$ ). Пористая структура и гидрофильно-гидрофобные свойства НКМ-Р были изучены методом MSCP. Таким образом, было показано, что NCM-R является предпочтительно гидрофильным углеродным материалом, в котором объемная доля гидрофобных пор составляет всего 2,6%; однако объемная доля гидрофобных микропор намного больше и составляет 25%. Была получена высокая удельная емкость 870 Ф/г, в основном за счет псевдоемкости реакции Фарадея (при средней удельной емкости двойного электрического слоя 210 Ф/г). По характеристикам заряда и разряда установлено, что NCM-R является перспективным материалом для электродов суперконденсаторов с временем разряда в секундах, а также перспективным материалом для анодов асимметричных суперконденсаторов с высокой удельной энергией. Импедансным методом установлено, что в области отрицательных потенциалов NCM-R обладает все более активным сопротивлением и замедленным диффузионным транспортом.

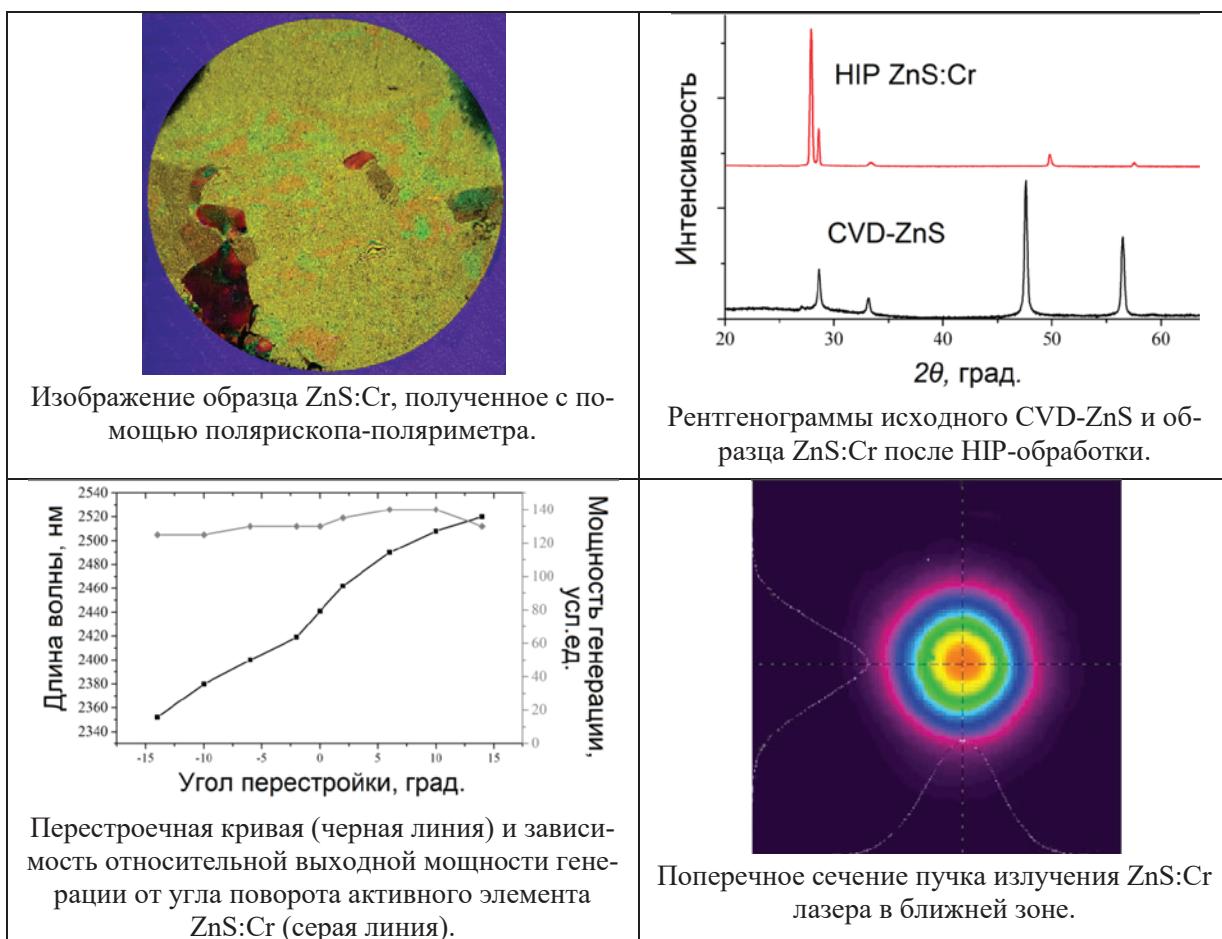
1. Ali, I., Zakharchenko, E. A., Myasoedova, G. V., Molochnikova, N. P., Rodionova, A. A., Tkachev, A. G., ... & Ghfar, A. (2021). Preparation and characterization of oxidized graphene for actinides and rare earth elements removal in nitric acid solutions from nuclear wastes. *Journal of Molecular Liquids*, 335, 116260.
2. Shulga, Y. M., Kabachkov, E. N., Korepanov, V. I., Khodos, I. I., Kovalev, D. Y., Tkachev, A. G., ... & Gutsev, G. L. (2021). The Concentration of C (sp<sup>3</sup>) Atoms and Properties of An Activated Carbon with over 3000 m<sup>2</sup>/g BET Surface Area. *Nanomaterials* 2021, 11, 1324.
3. Volkovich, Y. M., Sosenkin, V. E., Rychagov, A. Y., Melezhik, A. V., Tkachev, A. G., Kabachkov, E. N., ... & Shulga, Y. M. (2021). Carbon material with high specific surface area and high pseudocapacitance: Possible application in supercapacitors. *Microporous and Mesoporous Materials*, 319, 111063.

## АНИЗОТРОПНЫЕ МОНОКРИСТАЛЛЫ ZNS:CR<sup>2+</sup> ДЛЯ КОМПАКТНЫХ ПЕРЕСТРАИВАЕМЫХ ИК-ЛАЗЕРОВ

Е.М. Гаврищук<sup>1</sup>, С.В. Курашкин<sup>1</sup>, В.Б. Иконников<sup>1</sup>, Д.В. Савин<sup>1</sup>, О.В.  
Мартынова<sup>2</sup>, А.П. Савикин<sup>2</sup>

*Институт химии высокочистых веществ им. Г. Г. Девятых<sup>1</sup>  
Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет  
имени Н. И. Лобачевского<sup>2</sup>*

Развит и реализован метод получения монокристаллов сульфида цинка твердофазной рекристаллизации CVD-ZnS в процессе НИР-обработки. Изготовлены монокристаллы ZnS:Cr<sup>2+</sup> высокого оптического качества в модификации вюрцита, что установлено методами рентгенодифрактометрического анализа и поляриметрии. На анизотропном активном элементе получена лазерная генерация в схеме с коротким плоскопараллельным резонатором при накачке импульсно-периодическим YAP:Tm<sup>3+</sup> лазером с эффективностью по поглощенной мощности 78%. Максимальная выходная мощность, ограниченная мощностью накачки, составила 900 мВт при генерации излучения в спектральной полосе с полушириной 30 нм с центром на 2.45 мкм. При использовании ZnS:Cr<sup>2+</sup> в качестве оптически активного интерференционно-поляризационного фильтра осуществлена плавная перестройка генерируемого излучения в диапазоне 2.34-2.52 мкм с практически горизонтальной перестроечной кривой. Разработанная методика выращивания легированных халькогенидных кристаллов перспективна для изготовления оптически активных анизотропных сред компактных перестриваемых по длине волн лазеров ИК-диапазона для спектроскопии.



S. V. Kurashkin,. Anisotropic ZnS:Cr<sub>2+</sub> crystal: material for compact and efficient mid-IR tunable lasers. O. V. Martynova, D. V. Savin, V. B. Ikonnikov, E.M. Gavrilchuk, A. P. Savikin // Optics Letters, Vol. 46, Issue 23. pp.5994-5997 (2021). <https://doi.org/10.1364/OL.437886>

## МОНОИЗОТОПНЫЕ ВЕЩЕСТВА С ВЫСОКОЙ ИЗОТОПНОЙ И ХИМИЧЕСКОЙ ЧИСТОТОЙ И МАТЕРИАЛЫ НА ИХ ОСНОВЕ

А.Д. Буланов, В.А. Гавва, О.Ю. Трошин, С.А. Адамчик, Н.В. Абросимов (IKZ, г. Берлин), А.Ю. Лашков, А.М. Гибин,, А.Н. Гурьянов, М.Ю. Салганский, А.Ю. Созин, А.М. Потапов, П.А. Отопкова

*Институт химии высокочистых веществ им. Г. Г. Девятых*

Реализована лабораторная технология высокочистого <sup>28</sup>SiH<sub>4</sub> с содержанием изотопа <sup>28</sup>Si более 99,99 ат.%. Данная технология позволяет получать изотопно-обогащенный моносилен с изотопной и химической чистотой на уровне 4N7 (99,997 ат. %) и 6N, соответственно. Производимый изотопно-обогащенный <sup>28</sup>SiH<sub>4</sub> и получаемый из него высокочистый кремний-28 востребован на мировом рынке и поставляется российским и зарубежным заказчикам (Франция, Канада, Китай) для проведения научных исследований, в том числе для создания прототипов квантового компьютера.

В 2021 году получен монокристаллический образец германия-70 с содержанием основного изотопа  $99,92597 \pm 0,00040$  ат. % и с содержанием примесей химических элементов ниже  $10^{-5} - 10^{-6}$  ат. % (рис.1). В результате получена серия высокочистых монокристаллических образцов всех стабильных изотопов германия <sup>70</sup>Ge, <sup>72</sup>Ge, <sup>73</sup>Ge, <sup>74</sup>Ge с изотопной чистотой 99,9% и <sup>76</sup>Ge с изотопной чистотой 88%. Это делает возможным высокоточное измерение свойств, системное и глубокое изучение изотопных эффектов в

свойствах индивидуальных изотопов германия, а также создает предпосылки для создания новых материалов на основе изотопно-чистых веществ.

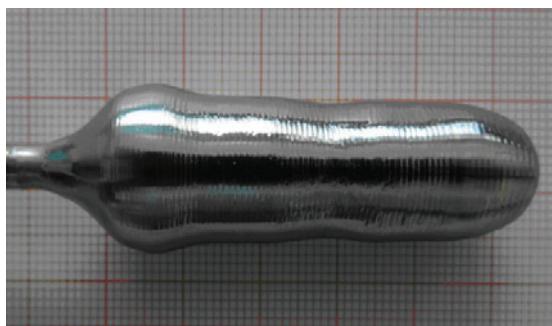


Рисунок 1. Образец изотопно-обогащенного  $^{70}\text{Ge}$  (степень обогащения по  $^{70}\text{Ge} 99,92597 \pm 0,00040$  ат.%)

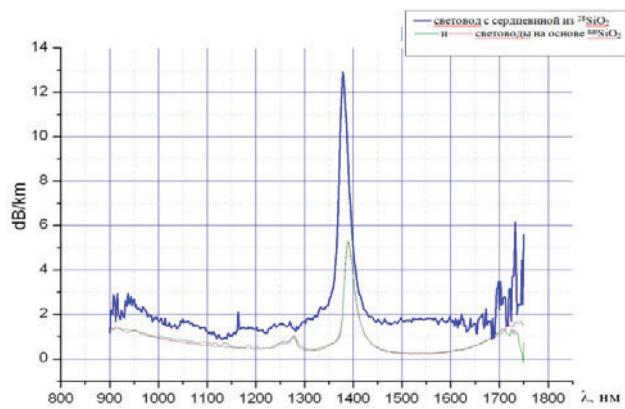


Рисунок 2. Спектр оптических потерь световодов на основе  $^{28}\text{SiO}_2$  и  $^{\text{nat}}\text{SiO}_2$

Впервые получен образец волоконного световода из кварцевого стекла с сердцевиной на основе изотопно-обогащенного диоксида кремния-28. Методом парофазного химического осаждения получена заготовка кварцевого световода со световедущей сердцевиной из изотопно-обогащенного  $^{28}\text{SiO}_2$  с обогащением по  $^{28}\text{Si}$  более 99,99 ат. %, легированной фтором. В качестве прекурсоров использовали высокочистый  $^{28}\text{SiCl}_4$ , полученный в ИХВВ РАН из простых высокочистых веществ и очищенный дистилляционным методом, а также изотопно-обогащенный  $^{28}\text{SiF}_4$ . В волоконном световоде из  $^{28}\text{SiO}_2$  оптические потери в диапазоне длин волн 910-1750 нм составили 2 дБ/км; спектр оптических потерь кварцевых световодов с модифицированным и естественным (для сравнения) изотопным составом приведен на рис. 2. Развитая технология кварцевых световодов из диоксида кремния, монозотопного по кремнию и кислороду, позволит глубже изучить изотопный эффект в оптических свойствах и радиационной стойкости кварцевых волоконных световодов.

- Чурбанов М.Ф., Буланов А.Д., Трошин О.Ю. и др. Патент РФ № 2618265 от 03.05.2017.
- Чурбанов М.Ф., Буланов А.Д., Трошин О.Ю. и др. Патент РФ № 2692310 от 24.06.2019.
- В.А. Гавва, О.Ю. Трошин, С.А. Адамчик, А.Ю. Лашков, Н.В. Абросимов, А.М. Гибин, В.А. Липский, А.М. Потапов, А.Ю. Созин, А.Д. Буланов / Получение монокристаллического изотопно-обогащенного германия-70 гидридным методом / Неорганические материалы. Направлена в печать. 2022.

## ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНИТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МИКРОЧАСТИЦ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

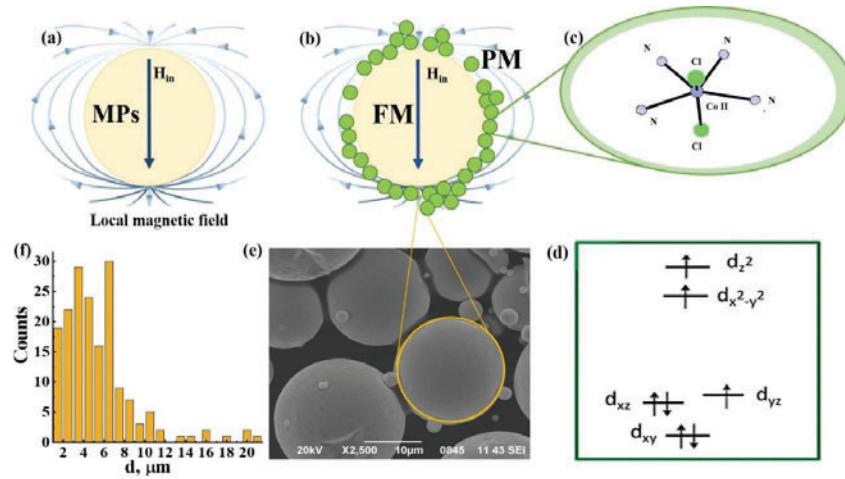
**О.В. Коплак, Е.В. Дворецкая, А.В. Палий, Р.Б. Моргунов**  
*Институт проблем химической физики РАН*

Создан композитный материал, обеспечивающий проявление SIM свойств в отсутствие внешнего поля.

Оптимизирован частотный диапазон магнитной релаксации при диагностике одно-ионных и одно-молекулярных магнитов в ферромагнитном композите. Высокая остаточная намагниченность микрочастиц PrDyFeCoB достаточна для наблюдения медленной спиновой релаксации в комплексах одно-ионных молекулярных магнитов  $[\text{CoLCl}_2]\text{H}_2\text{O}$  в отсутствие внешнего магнитного поля. Выбор микро- или наночастиц разных типов (с разными остаточными намагниченностями и разными коэрцитивными полями) позволяет

подобрать нужное поле рассеяния, с помощью которого становится возможно регулировать скорость релаксации спинов в комплексах, покрывающих микрочастицы.

### Микрочастицы



1. E. Dvoretskaya, A. Palii, O. Koplak, R. Morgunov. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 157, 110210, 2021. Q2.

2. О.В. Коплак, Е.В. Дворецкая, Е.И. Куницына, Д.В. Королев, А.В. Палий, Р.Б. Моргунов. Письма в ЖЭТФ, 113 (12), 825 – 832, 2021.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ПРИ АЛИТИРОВАНИИ НА ПРОЦЕССЫ ФОРМИРОВАНИЯ ДИФФУЗИОННЫХ ПОКРЫТИЙ СИСТЕМЫ ЖЕЛЕЗО-ХРОМ-АЛЮМИНИЙ

**В.И. Лысак, В.Г. Шморгун, В.П. Кулевич, А.И. Богданов**  
Волгоградский государственный технический университет

Исследование диффузионных покрытий, полученных на поверхности сталей Ст3 и 12Х18Н10, а также сплава Х15Ю5 при их алитировании погружением в расплав алюминия при температуре 780°C в течение 1 мин с одновременным действием ультразвука (УЗ) частотой 20 кГц и амплитудой 5-7 мкм показало следующее.

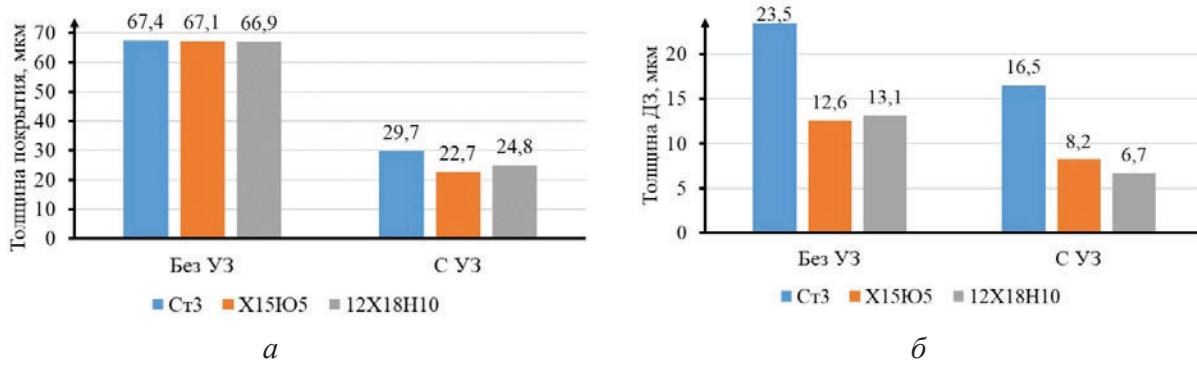


Рис. 1. Влияние УЗ воздействия при алитировании в расплаве алюминия на толщину покрытия (а) и ДЗ (б)

УЗ воздействие при алитировании приводит к снижению общей толщины формируемого покрытия в 2 раза для Ст3 и в 3 раза для сплавов Х15Ю5 и 12Х18Н10 (рис. 1, а). Вместе с этим наблюдается значительное снижение толщины сплошной диффузионной

зоны (ДЗ) в составе покрытия, формирующейся на границе контакта «твердое тело - жидкий расплав» (рис. 1, б), что может быть обусловлено более активным отделением фрагментов ДЗ от поверхности раздела фаз и ее растворением в алюминиевой матрице.

Кроме влияния на толщину формируемого покрытия, УЗ воздействие значительно улучшило адгезию алюминиевого расплава к подложке. В процессе классического алитирования погружением в расплав важно качественно подготавливать поверхность изделия для обеспечения взаимодействия алюминия с материалом подложки по всей поверхности. Присутствие на поверхности изделия оксидных пленок, загрязнений или жировых следов приводит к несплошности покрытия и его частичному или полному отслаиванию. Кроме этого, для некоторых материалов (например, сплав X15Ю5) требуется применение флюсов и увеличение времени выдержки в расплаве из-за плотной оксидной пленки, препятствующей диффузии алюминия. УЗ воздействие способствует разрушению оксидных пленок на поверхности изделия, отделению загрязнений, повышению смачиваемости материала расплавом алюминия, что приводит к формированию сплошного покрытия по всей площади поверхности.

Для оценки сплошности покрытия было проведено измерение протяженности покрытия, плотно прилегающего к подложке без пор, трещин или разрушения по отношению к периметру образца в плоскости микрошлифа. Результаты измерений (рис. 2) показали, что в случае хорошо алитируемой стали Ст3 воздействие УЗ позволило увеличить сплошность покрытия на 12%, а в случае сплавов X15Ю5 и 12Х18Н10 на 59% и 28%, соответственно.

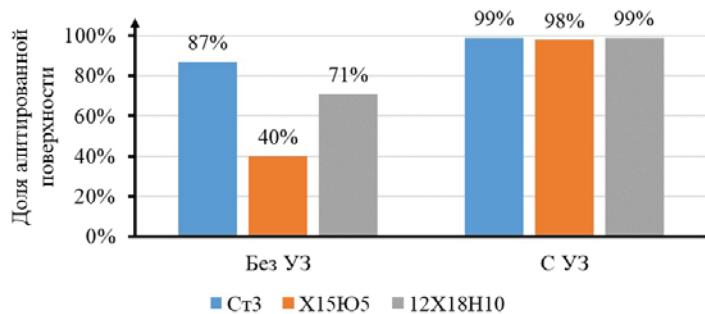


Рис. 2. Влияние УЗ воздействия при алитировании в расплаве алюминия на сплошность формируемого диффузационного покрытия

Данные рентгенофазового и энергодисперсионного анализа показали, что воздействие УЗ на образец в процессе алитирования не оказывает влияния на фазовый состав формируемого покрытия и сплошной ДЗ.



Рис. 3. Структура покрытия после алитирования сплава X15Ю5 в расплаве алюминия без воздействия УЗ (а) и с УЗ (б)

Более детальное исследование структуры покрытий на электронном микроскопе (рис. 3) позволило установить, что на сплаве X15Ю5 под воздействием УЗ был практичес-

ски полностью подавлен рост прослойки интерметаллида  $\text{Fe}_2\text{Al}_5$  ( $\sim 5\text{-}7 \text{ мкм}$  без УЗ против  $\sim 0,5\text{-}1 \text{ мкм}$  с УЗ) в составе сплошной ДЗ.

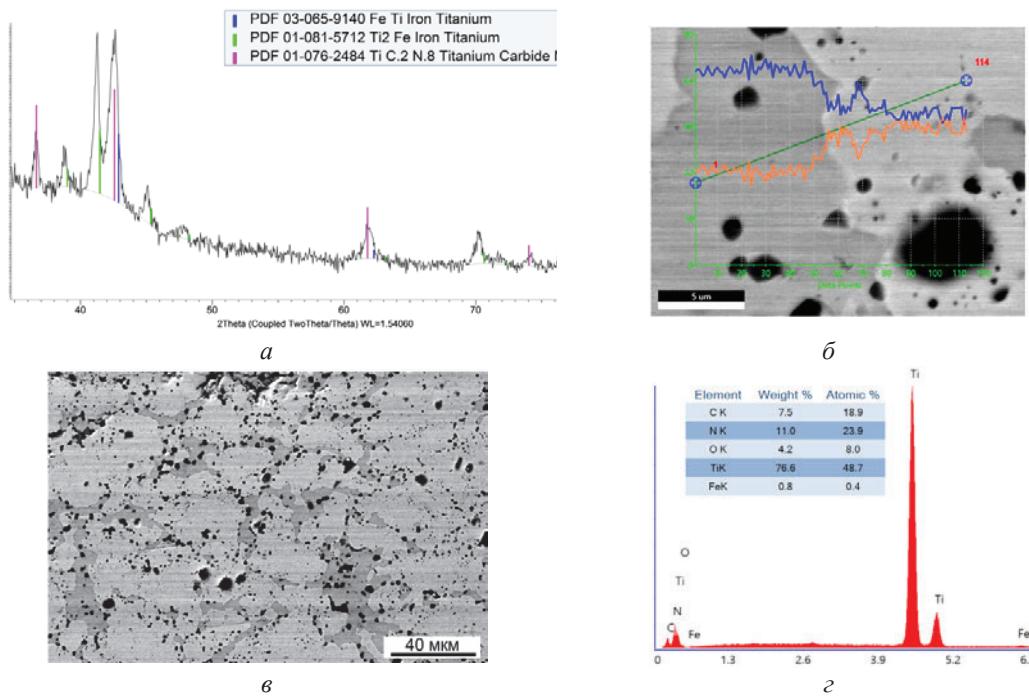
Таким образом, установлено, что воздействие ультразвука на расплав алюминия, не оказывая влияния на фазовый состав сплошной диффузационной зоны, формирующейся в результате протекания гетерогенных реакций на границе алюминия со сплавами на основе железа, приводит к уменьшению ее толщины на 30-50 % при частоте подводимых акустических колебаний 20 кГц и амплитуде 5-7 мкм. При этом в результате дополнительного очищающего действия УЗ улучшается смачиваемость сплавов алюминием, повышаются сплошность соединения и качество формируемого покрытия в целом.

## ПОЛУЧЕНИЕ, КИНЕТИКА ГИДРИРОВАНИЯ И ВОДОРОДНАЯ ЕМКОСТЬ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ $\text{TiFe}+\text{Ti}_2\text{Fe}$

**В.И. Лысак, С.В. Кузьмин, А.В. Крохалев, О.О. Тужиков, В.О.Харламов,  
Д.Р. Черников**

*Волгоградский государственный технический университет*

Впервые экспериментально установлена возможность получения термодинамически неравновесных материалов на основе  $\text{TiFe} + \text{Ti}_2\text{Fe}$  (рис.1, *a* и *б*) с использованием взрывного прессования смесей порошков титана и железа с последующим реакционным спеканием прессовок. Содержание метастабильной фазы  $\text{Ti}_2\text{Fe}$  в материале с 57 ат.% Ti и 43 ат.% Fe составило 14,7 об. % (рис.1, *в*). При этом сопутствующие примеси внедрения (кислород, азот и углерод), оказывающие отрицательное влияние на водородную емкость  $\text{TiFe}$ , оказались связанными в карбонитриды (рис.1, *г*).



**Рис. 1.** Фазовый состав (*а*, *б*), микроструктура (*в*) и химический состав карбонитридных включений в порошковом материале, содержащем 57 ат.% Ti и 43 ат.% Fe после прессования взрывом и реакционного спекания

Определены водородсорбционные свойства полученного материала. Гидрирование проводили при температуре 20°C и атмосферном давлении. Измерения осуществляли в трехэлектродной ячейке с 9 М водным раствором KOH в качестве электролита,  $\text{Ni}(\text{OH})_2/\text{NiOOH}$ -противоэлектродом и  $\text{Hg}/\text{HgO}$ -электродом сравнения. С использованием

полученных хроноамперометрических кривых (рис.2, а) и их математической обработки (в рамках модели, базирующейся на феноменологическом уравнении Авраами–Ерофеева) выявлено, что механизм насыщения водородом соответствует классическим представлениям о реакционной диффузии: процесс начинается с образования на поверхности материала слоя твердых растворов водорода в исходных фазах и по истечению латентного периода продолжается с формированием слоя гидридных фаз (рис.2, б).

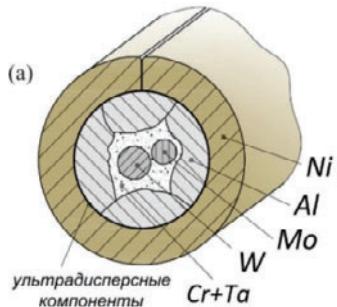
С использованием параметрической идентификации в рамках модели параболического закона роста диффузионных слоев Тммана установлено, что весовое содержание водорода в гидридовом слое на поверхности исследованного материала превышает 2,7 мас. %, что заметно выше водородной емкости чистого TiFe (1,86 % по массе). Это позволяет сделать вывод о положительном влиянии метастабильного интерметаллида  $Ti_2Fe$  на свойства материала в целом.

## РАЗРАБОТКА ПРИНЦИПОВ ПОЛУЧЕНИЯ АБРАЗИВОСТОЙКОГО ДО 1100 °С СПЛАВА НА ОСНОВЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ЕГО СТРУКТУРЫ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ ТУГОПЛАВКИХ КОМПОНЕНТОВ

В.И. Лысак, И.В. Зорин, С.К. Елсуков

*Волгоградский государственный технический университет*

Выявлено, что разделение электрода на две композиционные проволоки (рис. 1) при электродуговой наплавке сплава на основе легированного алюминида никеля ( $Ni_3Al$ ) способствует уменьшению температурного градиента в сварочной ванне, преимущественно вблизи фронта кристаллизации, а также создает эффект уменьшения нагрева металлической капли, содержащей ультрадисперсные частицы карбида WC.

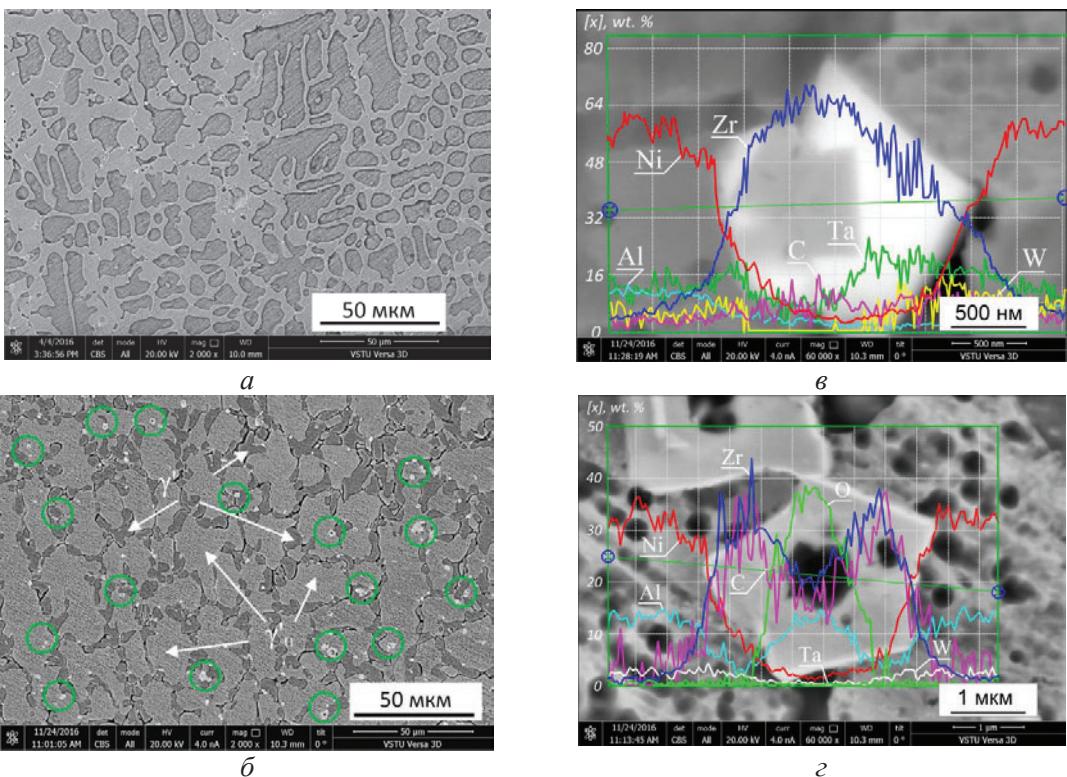


**Рис. 1.** Схематическое изображение композиционной проволоки (КП):  
*Ni – никелевая оболочка; Al – деформированные в процессе волочения КП алюминиевые проволоки; Cr+Ta – порошковая составляющая наполнителя; W, Mo – тугоплавкий сердечник (вольфрамовая и молибденовая проволоки).*

В результате создаются условия для формирования в процессе наплавки композиционной структуры металла системы  $Ni-Al-Cr-W-Mo-Zr$ , которая в отличие от псевдоэвтектической структуры (рис. 2-а) (полученной без использования «расщепленного» электрода) состоит из легированного  $\gamma' + \gamma$  твердого раствора на основе  $\gamma'-Ni_3Al$  фазы и упрочняющих фаз двух видов (рис. 2-б).

В одном случае упрочняющая фаза представляет интерметаллическое соединение, которое формируется вокруг карбида ZrC и содержит в своем составе оставшиеся тугоплавкие легирующие элементы – W, Ta (2-в). Образование фазы второго типа происходит также под влиянием углерода, образовавшегося в результате диссоциации ультрадисперсного карбида WC. В присутствии атомов алюминия сначала образуется соединение  $Al_2O_3$ , а затем вокруг этого соединения формируется карбид типа ZrC (рис. 2 г).

Установлено, что повышенные значения сопротивления наплавленного металла деформированию (закрепленным абразивом) при температурах 1100 °С наиболее эффективно в диапазоне содержания частиц WC в наполнителе композиционной проволоки 0,3–0,6 масс. %.



**Рис. 2.** Структуры сплавов, наплавленных методом расщепленного электрода (а) и одноэлектродной наплавкой (б): фазы, образовавшиеся под влиянием наночастиц WC: ZrC + ZrTaW (в) и Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + ZrC (г). Содержание наночастиц карбида WC в наполнителе композиционной проволоки 0,5 масс.%

1. Перспективы применения расщепленного электрода для введения в сварочную ванну модификатора при наплавке сплава на основе Ni<sub>3</sub>Al / Зорин И.В., Дубцов Ю.Н., Лысак В.И., Елсуков С.К. // Сварка и диагностика. - 2021. - № 5. - С. 30-34.
2. Патент РФ № 2711286. Композиционная проволока для дуговой наплавки / Зорин И.В., Соколов Г.Н., Дубцов Ю.Н., Лысак В.И., Фастов С.А. Опубликовано 16.01.2020, Бюл. № 2

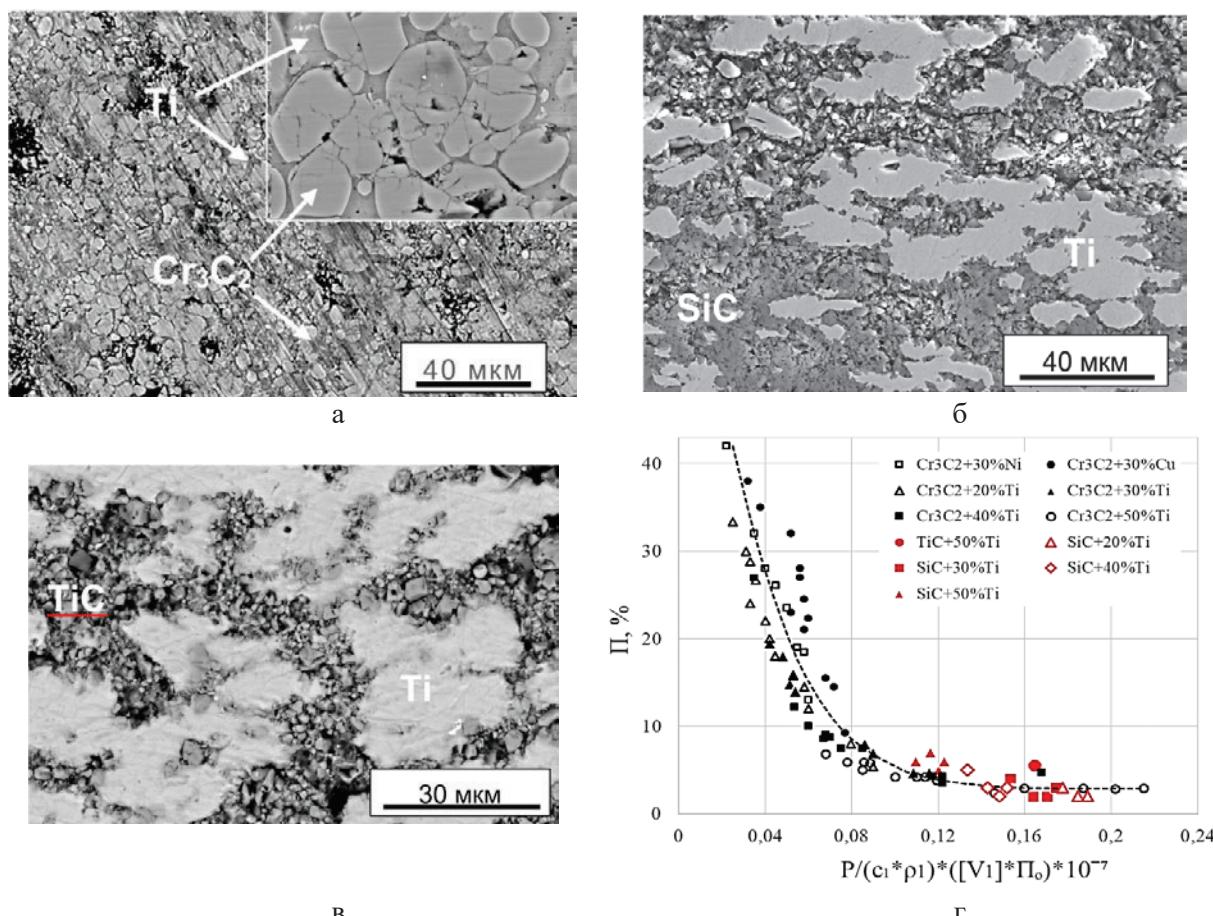
## ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ ИЗНОСОСТОЙКИХ ПОРОШКОВЫХ ТВЕРДЫХ СПЛАВОВ И ПОКРЫТИЙ ИЗ НИХ ВЗРЫВНЫМ ПРЕССОВАНИЕМ БЕЗ СПЕКАНИЯ

**В.И. Лысак, А.В. Крохалев**  
Волгоградский государственный технический университет

Установлено, что при взрывном прессовании на металлических подложках порошковых смесей Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub>-Ti, TiC-Ti и SiC-Ti основным фактором, определяющим уплотнение порошковых смесей, содержащих в своем составе частицы тугоплавких карбидов и металлической связки, является динамическое вытеснение одной из фазовых составляющих смеси в исходные поры порошка. В качестве фазовой составляющей смеси, перемещение которой ведет к образованию непрерывной матрицы в структуре спрессованного взрывом материала, может выступать как металлическая связка (в случае прессования смесей порошков системы Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub>-Ti, рис. а), так и карбидная составляющая материала (при прессовании смесей порошков SiC-Ti и TiC-Ti, рис. б и в).

Предложен феноменологический критерий уплотняемости порошковых смесей карбидов с металлами, определяющий остаточную пористость спрессованных взрывом материалов:  $\frac{[V_1]*\rho_0}{c_1*\rho_1}$ , где [V<sub>1</sub>] – объёмная доля составляющей смеси, обеспечивающей заполнение

ние исходных пор порошка;  $c_1$ ,  $\rho_1$  – скорость звука и плотность этой составляющей;  $\Pi_0$  – исходная пористость порошковой смеси (рис. 2).



**Рис.** Микроструктура порошковых материалов на основе карбида хрома (а), карбида кремния (б) и карбида титана (в) и зависимость их остаточной пористости  $\Pi$  от давления ударно-волнового сжатия  $P$  и предложенного критерия прессуемости

1. Исследование механизма уплотнения смесей порошков тугоплавких карбидов с металлической связкой при взрывном прессовании на металлической подложке / Крохалев А.В., Харламов В.О., Черников Д.Р., Косова Е.А., Кузьмин С.В., Лысак В.И. // Известия Волгоградского государственного технического университета. 2021. № 4 (251). С. 42-47.

## МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ ЛОКАЛЬНОГО ФАЗОВОГО СОСТАВА И МОРФОЛОГИИ СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ «ЖЕСТКОГО» СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

**А. Маликов, А. Оричич, И. Витошкин и др.**  
*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН*

В рамках программы создания экспериментальных станций Центра коллективного пользования «СКИФ», строящегося в Новосибирске, в ИХТТМ СО РАН разработана методика локального анализа морфологии и фазового состава сварных соединений.

В работе методом оптической металлографии было показано, что при лазерной сварке авиационных алюминиевых сплавов 1420 и Д16Т реализуются различные механизмы кристаллизации расплава со стороны контактирующих сплавов, и зона сварного соединения неоднородна (рис. 1).

Для локального исследования структуры и морфологии отдельных зон сварного шва разработана технология локального фазового анализа с использованием «жесткого» синхротронного излучения в геометрии на прохождение. Тонкий пучок (сечением 100 мкм) монохроматического синхротронного излучения проходит сквозь материал и создает дифракционную картину, которая регистрируется плоским двухкоординатным детектором (Рис. 2). Время экспозиции составляет 120 сек. Проинтегрированные по всем направлениям дифракционные картины представлены на рис. 3.

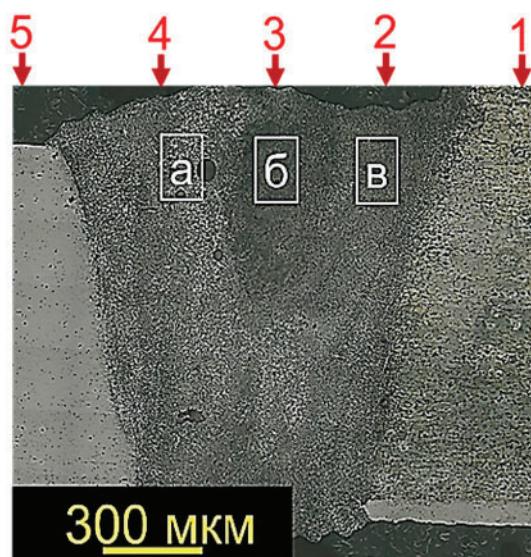


Рис. 1. Макроструктура сварного соединения (оптическая металлография)

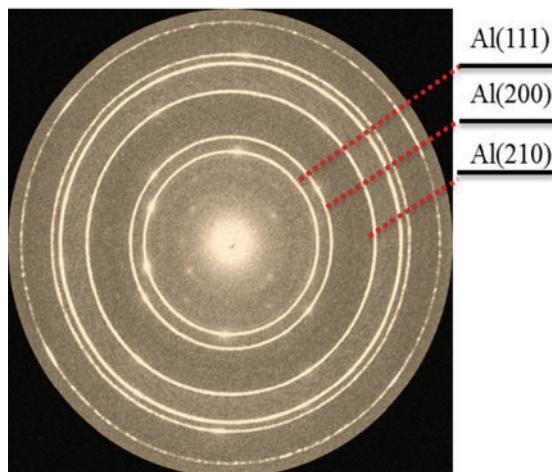


Рис. 2. Дифракционная картина от точки 4 сварного шва

Исследование показало, что в процессе сварки фазовый состав и распределение легирующих элементов в сварном шве существенно изменяются: в сварном шве кроме S( $\text{Al}_2\text{CuMg}$ ) формируется интерметаллидная фаза  $\theta(\text{Al}_2\text{Cu})$ ; в центре сварного шва -  $T_2(\text{Al}_6\text{CuLi}_3)$  и  $T(\text{Al}_{20}\text{Cu}_2\text{Mn}_3)$ .

Разработанная методика дает возможность проводить *in situ* исследования сварных швов в процессе термообработки. Подбор условий термообработки позволил получить для сварного соединения предел прочности на разрыв 92-96 % относительно более прочного сплава 1420.

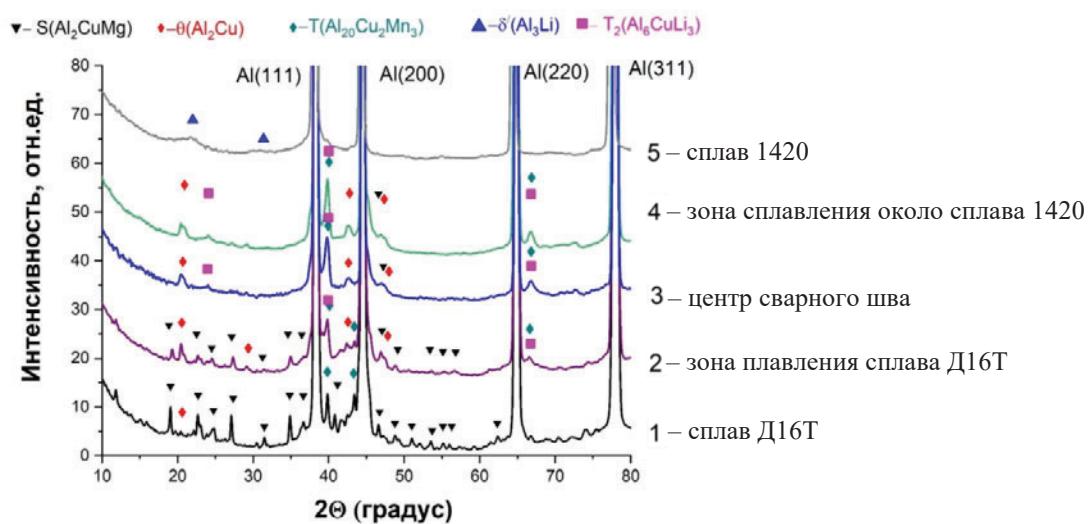


Рис. 3. Дифрактограммы (на прохождение) образца со сварным соединением



welds // Materials Science and Engineering: A. 2021. Vol. 809. Art. 140947. DOI: 10.1016/j.msea.2021.140947.

1. Malikov A., Orishich A., Vitoshkin I., Karlov E., Ancharov A. Effect of post-heat treatment on microstructure and mechanical properties of laser welded Al-Cu-Mg alloy // Journal of Manufacturing Processes. 2021. Vol. 64. P. 620-632.

DOI: 10.1016/j.jmapro.2021.02.008.

2. A. Malikov, A. Orishich, I. Vitoshkin, N. Bulina, E. Karlov, A. Gutakovskii, S. Batsanov, A. Ancharov, R. Tabakaev. Effect of the structure and the phase composition on the mechanical properties of Al–Cu–Li alloy laser

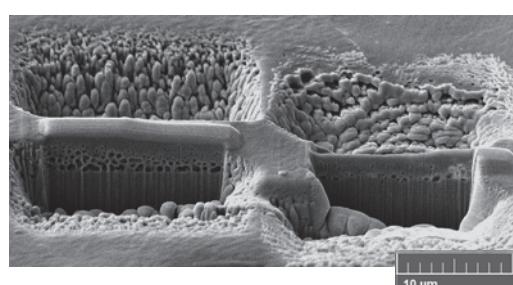
## ЯВЛЕНИЕ СИНЕРГИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ВЛИЯНИЯ ГЕЛИЯ И ВОДОРОДА В РАСПУХАНИИ СТАЛЕЙ

**О.Т. Грудевич, В.А. Печенкин, У.А. Кобец, А.Ф. Гурбич, М.В. Боховко,  
Р.А. Шагинян, Б.З. Марголин, С.Н. Петров, А.А. Сорокин**  
*АО «Наука и инновации» Госкорпорации «Росатом»*

При нейтронном облучении конструкционных материалов помимо радиационных повреждений, возникающих в результате прямого воздействия нейтронов, происходит наработка гелия и водорода в результате ядерных реакций на изотопах элементов состава конструкционных материалов (КМ), причем наработка водорода обычно существенно превосходит наработку гелия. На основе нейтронных спектров, рассчитанных в ГНЦ РФ – ФЭИ проведены расчеты наработки Не и Н в КМ в различных позициях имеющихся и перспективных быстрых реакторов.



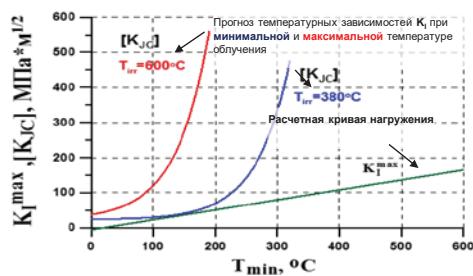
Ускоритель ионов TANDETRON  
в АО «ГНЦ РФ-ФЭИ»



Вырезка темплета из облученной поверхности методом  
сфокусированного ионного пучка (FIB)



Общий вид дискового  
образца  
для ионного облучения  
(D=12 мм, t=2мм)



Прогнозирование трещиностойкости для элементов ВКУ ВВЭР-  
СКД, подверженным различным температурам облучения

Имитационные исследования влияния гелия и водорода на распухание проведены на ускорителе «Тандем-3М» для условий наработки гелия и водорода в центре А3 реактора БОР-60 в стали X18H10T. Было реализовано циклическое последовательное облучение, в каждом цикле которого проводится облучение ионами Ni и затем ионами Не или Н (двой-

ное) или ионами Ni и затем ионами He, затем ионами H (тройное) с соответствующими наборами энергий и времени имплантации для He и для H такими, чтобы вдоль проективного пробега тяжелых ионов в зачетной области соблюдалось рассчитанное отношение концентрации имплантированного гелия или водорода к повреждающей дозе.

Впервые показано, что при тройном облучении ( $\text{Ni} + \text{He} + \text{H}$ ) распухание существенно выше, чем при двойном облучении ( $\text{Ni} + \text{He/H}$ ) этой стали, т.е. наблюдается синергический эффект гелия и водорода в распухании стали для условий их наработки в быстром реакторе.

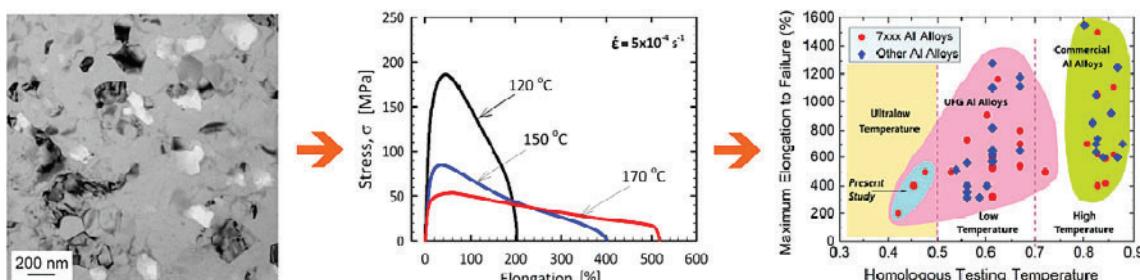
- Грудзевич О.Т., Печенкин В.А., Кобец У.А., Гурбич А.Ф., Баховко М.В., Шагинян Р.А., Марголин Б.З., Петров С.Н., Сорокин А.А. Высокодозные имитационные исследования радиационной стойкости штатных и перспективных конструкционных реакторных материалов // ВАНТ. Серия: Ядерно-реакторные константы, 2022 (в печати).

## СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ В АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ СЕРИИ 7XXX ПРИ СВЕРХНИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

**Р.З. Валиев с соавт.**

*Уфимский государственный авиационный технический университет*

Впервые обнаружена сверхпластичность при сверхнизких температурах в промышленном сплаве Al 7xxx серии за счет формирования ультрамелкозернистой (УМЗ) структуры методами ИПД, в которой сегрегации Zn присутствуют на границах зерен, обеспечивая ускоренную диффузию и повышенное зернограницочное проскальзывание при более низких температурах. Открытие низкотемпературной сверхпластичности имеет особый интерес для разработки новых технологий для сверхпластического формования изделий сложной формы с улучшенными служебными свойствами для работы при комнатной температуре.



- Nguyen Q. Chinh, Maxim Yu Murashkin, Elena V. Bobruk, János L. Lábár, Jenő Gubicza, Zsolt Kovács, Anwar Q. Ahmed, Verena Maier-Kiener & Ruslan Z. Valiev (2021) Ultralow-temperature superplasticity and its novel mechanism in ultrafine-grained Al alloys, Materials Research Letters, 9:11, 475-482, DOI: 10.1080/21663831.2021.1976293

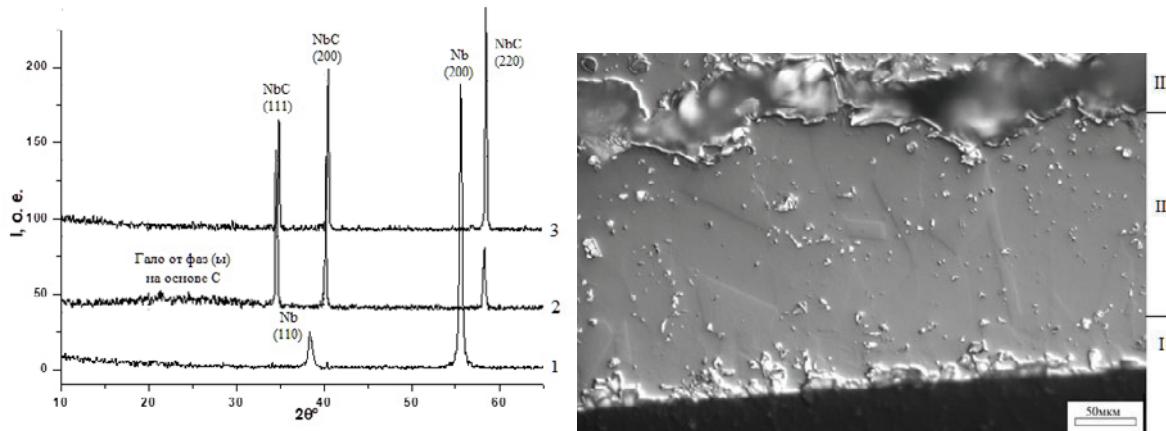
## СИНТЕЗ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ КАРБИДА НИОБИЯ ПРЯМОЙ КАРБИДИЗАЦИЕЙ НИОБИЯ

**К.А. Солнцев с сотр.**

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН*

Прямой карбидацией металлического проката в атмосфере газовой смеси аргона и этилена синтезированы образцы стехиометрического карбида ниобия NbC заданной формы. Формирование керамики происходит в две стадии: в результате взаимодействия ме-

талла с газообразным этиленом и при поглощении углерода, выделяющегося на поверхности образца в момент его разложения. В процессе полной карбидизации образуется анизотропная внутренняя полость, отражающая исходную форму образца, формирование которой характерно для керамики, синтезированной окислительным конструированием.



На поверхности и в объеме образца прочностные характеристики практически неизменны. Температурная зависимость продольного сопротивления  $R_{NbC}$  при нулевом магнитном поле в области температур 4.2–290 К согласуется с температурной зависимостью для образцов, синтезированных порошковыми технологиями, состав которых близок к составу исследуемого образца.

- Г.П. Кочанов, А.Н. Рогова, И.А. Ковалев, С.В. Шевцов, А.И. Ситников, А.В. Костюченко, С.Н. Климаев, А.А. Ашмарин, С.С. Стрельникова, А.С. Чернявский, К.А. Солнцев. Неорганические материалы, 2021, том 57, № 10, с. 1138–1143.

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРНО ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ ГПУ ТИТАНА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫХ УДАРНЫХ ВОЛН

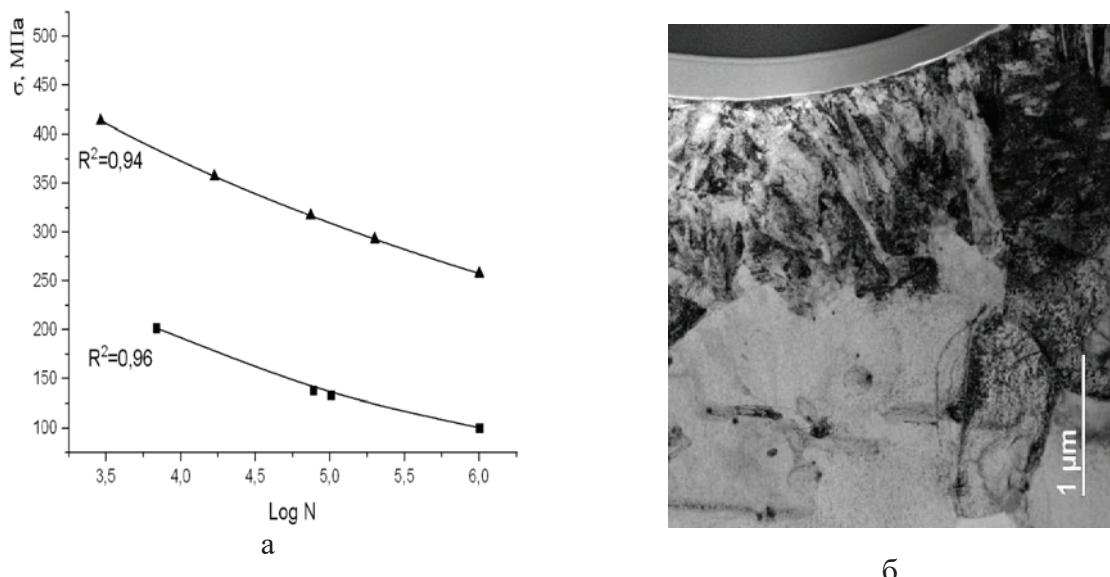
**Ю.Р. Колобов с сотр.**  
*Институт проблем химической физики РАН*

Проведено молекулярно-динамическое моделирование эволюции структурно фазового состояния ГПУ титана при воздействии лазерно-индукционных ударных волн. Установлено, что физическим механизмом формирования нанокристаллической структуры в титане в указанных условиях является процесс фазовой перекристаллизации, реализуемый в виде цепочки фазовых превращений от исходной ГПУ  $\alpha$ -фазы к  $\omega$ -фазе высокого давления, и вновь к исходной  $\alpha$ -фазе. Рассчитана предельная температура (700К); выше которой  $\alpha \rightarrow \omega$  фазовый переход в исследованных условиях не наблюдается.

На примере пластинчатых (толщиной ~1мм) образцов поликристаллического (размер зерен ~3 мкм) технически чистого титана (марки BT1-0) показано, что наноструктурирование тонких (1-3 мкм) приповерхностных слоев путем обработки лазерными импульсами наносекундной длительности по оптимизированному, в том числе на основе данных компьютерного моделирования, режиму обработки приводит к значительному (до двух раз) повышению условного предела выносливости при многоцикловой (до  $10^6$  циклов) усталости в режиме одноосного нагружения (см. рис. 1).

Также установлено, что обработка поверхностей титана и его сплавов воздействием импульсов короткой длительности приводит к улучшению биосовместимости титана. Кроме этого, рассматриваемая обработка поверхностей титановых сплавов может быть

использована как инструмент для нанесения цветных узоров и картин в художественном исполнении.



**Рис. 1.** а – кривые усталости для образцов сплава ВТ1-0 в исходном рекристаллизованном состоянии с размером зерен порядка 2–3 мкм (отмечены на графике ■) и после предварительной обработки лазерными импульсами наносекундной длительности (при плотности энергии 1 ГВт/см<sup>2</sup>) под слоем воды (отмечены на графике ▲);

б – микроструктура образца рекристаллизованного технически чистого титана (ВТ1-0) после обработки наносекундным лазерными импульсами (при плотности энергии 1 ГВт/см<sup>2</sup>) под слоем воды и усталостных испытаний (для  $1 \times 10^6$  циклов напряжение в цикле 100 МПа). Светлопольное изображение, просвечивающая электронная микроскопия.

1. Nelasov I. V., Kartamyshev A. I., Boev A. O., Lipnitskii A. G., Kolobov Y. R., Nguyen T. K.. Molecular dynamics simulation of the behavior of titanium under high-speed deformation //Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2021. – Т. 29. – №. 6. – С. 065007;
2. Kolobov Y. R., Manokhin S. S., Odintsova G. V., Betekhtin V. I., Kadomtsev A. G., Narykova M. V. Studying the Influence of Nanosecond Pulsed Laser Action on the Structure of Submicrocrystalline Titanium //Technical Physics Letters. – 2021. – С. 1-5;
3. Manokhin S. S., Tokmacheva-Kolobova A. Y., Karlagina Y. Y., Betekhtin V. I., Kadomtsev A. G., Narykova M. V., Kolobov Y. R. Investigation of Changes in the Structure of Submicrocrystalline Titanium of VT1-0 Brand under Heat Treatment and Laser Processing with Nanosecond Pulses //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2021. – Т. 15. – №. 1. – С. 59-64;
4. Tokmacheva-Kolobova A. Y. Investigation of the Mechanism of Nanostructuring of Near-Surface Titanium Layers under the Influence of Nanosecond Laser Pulses //Technical Physics Letters. – 2021. – Т. 47. – №. 2. – С. 143-146, Q4;
5. Ю.Р. Колобов, С.С. Манохин, В.И. Бетехтин, А.Г. Кадомцев, М.В. Нарыкова, Г.В. Одинцова, Г.В. Храмов Исследование влияния обработки лазерными импульсами наносекундной длительности на микроструктуру и сопротивление усталости технически чистого титана // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 48. № 2. С. 15-19.;
6. Veiko V., Karlagina Y., Itina T., Kuznetsova D., Elagin V., Zagaynova E., Chernenko G., Egorova E., Zernitskaia C., Manokhin S., Tokmacheva-Kolobova A. Laser-assisted fabrication and in vitro verification of functionalized surface for cells biointegration// Optics & Laser Technology - 2021 – 138, – p.106871;
7. Veiko V. P., Andreeva Y., Van Cuong L., Lutoshina D., Polyakov D., Sinev D., Odintsova G., Kolobov Y.R. Laser paintbrush as a tool for modern art //Optica. – 2021. – Т. 8. – №. 5. – С. 577-585.

**ИСПЫТАТЕЛЬНЫЙ СТЕНД ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ  
И НАТУРНЫХ ПРОМЫШЛЕННЫХ ИСПЫТАНИЙ НА ФРИКЦИОННЫЙ ИЗНОС  
ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫХ ИДЕНТИФИКАЦИОННЫХ КОДОВ  
НА ПОВЕРХНОСТИ КОНСТРУКЦИОННЫХ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ  
МАТЕРИАЛОВ РАЗЛИЧНОГО НАЗНАЧЕНИЯ**

**Ю.Р. Колобов с сотр.**  
*Институт проблем химической физики РАН*

Инновационная разработка выполнена в рамках реализации комплексного проекта «Создание высокотехнологичного производства, оборудования и технологий нанесения лазерных штрих-кодов для маркировки перемещаемых товаров и их оптической идентификации для реализации современных систем управления материальными потоками», осуществляемого на базе ООО «Лазерный центр», г. Санкт-Петербург (Заказчик проекта), по гранту в формате конкурса, объявляемого в соответствии с Постановлением Правительства Российской Федерации №218 от 9 апреля 2010 г.

В рамках данного проекта исполнителем (ИПХФ РАН) проведены научно-исследовательские, опытно-конструкторские и технологические работы по проектированию, изготовлению и аттестации двухмодульного компьютеризированного испытательного стенда для определения механической и химической устойчивости при различных температурах лазерно-индуцированных идентификационных штрих-кодов, применяемых для формирования маркеров на поверхности конструкционных и функциональных материалов и изделий из них различного назначения.

С использованием разработанного испытательного стенда проведены научно-исследовательские и опытно-конструкторские технологические работы по изучению методами оптической металлографии, растровой и просвечивающей электронной микроскопии (в том числе с прямым разрешением кристаллической решетки) микроструктуры, элементного и фазового состава поверхности и тонких приповерхностных слоёв неорганических (металлы, сплавы, полупроводниковые соединения, керамика, стекло, полимеры и др.) и других материалов (кожа, ткань, бумага, картон и др.), направленные на характеристицию поверхности и приповерхностных слоев указанных материалов до и после лазерной обработки, а также после испытаний по тестированию устойчивости сформированных лазерно-индуцированных штрих-кодов к механическим, термическим и химическим повреждением указанных материалов.



**Рис. 1.** Двухмодульный компьютеризированный испытательный стенд для определения механической и химической устойчивости лазерно-индуцированных идентификационных штрих-кодов в широком интервале температур, в том числе в растворах с различной величиной pH

С целью повышения устойчивости лазерно-индуцированных идентификационных кодов и надежности их считывания для исследованных материалов были выработаны ре-

комендации по предварительной подготовке поверхности, режимам нанесения и считывания идентификационных кодов. Разработаны требования к хранению и эксплуатации изделий, имеющих поверхностную лазерную кодировку, на предельно допустимые уровни внешнего воздействия на поверхности конструкционных и функциональных материалов.

1. Pryakhin E.I., Ligachev A.E., Kolobov Y.R., Zakharenko E.A., Romanov V.V. Assessment of the thermal effect on the surface of metal structural materials on the stability of laser-induced codes readability // Materials Science Forum. – 2021. – V. 1040. – P. 47-54;
2. Колобов Ю.Р. Лигачев А.Е. Свойства поверхности конструкционных материалов в области штрих-кода, сформированного под воздействием лазерного излучения // Физика и химия обработки материалов. 2021. №1. С.15-24;
3. Veiko V. P., Andreeva Y., Van Cuong L., Lutoshina D., Polyakov D., Sinev D., Odintsova G., Kolobov YR Laser paintbrush as a tool for modern art //Optica. – 2021. – Т. 8. – №. 5. – С. 577-585;
4. Veiko V., Karlagina Y., Itina T., Kuznetsova D., Elagin V., Zagaynova E., Chernenko G., Egorova E., Zernitskaia C., Manokhin S., Tokmacheva-Kolobova A. Laser-assisted fabrication and in vitro verification of functionalized surface for cells biointegration// Optics & Laser Technology. – 2021 – 138, – p.106871.

## **НОВЫЙ АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ 3D-ЗАДАЧ РАССЕЯНИЯ УЛЬТРАЗВУКА НА ТРЕЩИНАХ В УПРУГИХ СРЕДАХ**

**Н.П. Алешин с сотр.**

*Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана*

Разработан новый аналитический метод решения 3D-задач рассеяния ультразвука на трещинах в упругих средах. На примере трещины в виде дискообразной полости в упругой среде, получены в квадратурах аналитические выражения, которые в дальнейшем можно использовать в качестве эталонных при моделировании рассеяния ультразвука на различных трещинах в упругих средах при произвольном направлении распространения и приема используемых волн в различных современных материалах, таких как анизотропные материалы, полученные в ходе выращивания изделий с применением аддитивных технологий, современные стали, полиэтилены и прочее. Это дает возможность в мегагерцовом диапазоне частот детально рассмотреть ранее мало изученные физико-математические модели взаимодействия упругих продольных, поперечных и Релеевских волн с нарушениями структуры материалов и сварных швов. На этой основе в работе проведены исследования ряда тонких особенностей выявления дефектов в металлах, пластмассах, сварных швах, и предложены новые подходы к совершенствованию методов их выявления и идентификации.

Целью работ являлось повышение достоверности результатов акустического неразрушающего контроля изделий из современных материалов, за счет уточнения модели взаимодействия упругих колебаний с нарушением однородности структуры.

Объект исследования - несплошности структуры материала с малой величиной раскрытия, плоскостные и объемные, расположенные на поверхности и в объеме контролируемых изделий.

Для достижения результата использован подход, опубликованный академиком Н.П. Алешиным с соавторами в 1986 – 1988 года (Алешин Н.П., Каменский Д.В., Каменский В.С., Могильнер Л.Ю. Дифракция упругой волны на свободном от напряжений диске // Докл. АН СССР. 1988. Т. 302, №4. С. 777-780) и развитый в ходе выполнения настоящей работы. Применительно к 3D-задаче для дискообразной трещины полученные результаты также частично опубликованы в 2021 году [1]. В основе этого подхода лежит правильно выбранный вид потенциалов упругих волн, который позволил существенно упростить приведенные уравнения.

Применялись аналитические и численные методы расчета рассеяния упругих волн на ребрах и поверхностях дефектов. Проведено уточнение физико-математических моделей взаимодействия ультразвука с дефектами в материалах и сварных швах. В том числе теоретически уточнены направления рассеяния ультразвука от несплошностей различного типа, в которых можно принять сигналы с максимальной амплитудой. Разработаны предложения по обеспечению максимальной чувствительности ультразвукового контроля. Впервые показано, как можно использовать Релеевские волны, генерируемые электромагнитно-акустическими преобразователями, для идентификации типа поверхностных дефектов. В работе отмечено, как сдвиг фаз между волнами, зеркально отраженными от поверхности трещины и дифрагированными на ее ребрах, зависит от ориентации трещины относительно направления на источник и приемник ультразвука и от размера трещины. Особенно велика амплитуда этих осцилляций при рассеянии SV-волны в связи с возбуждением на поверхностях мишени волн Релея.

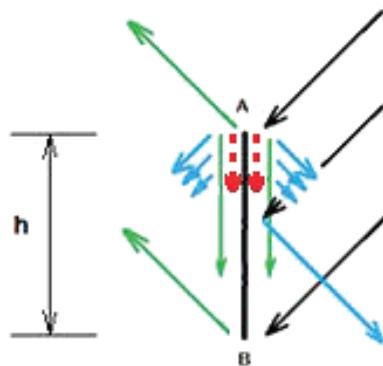


Рис. 1. Диаграмма рассеяния ультразвука на плоском дефекте в упругой среде

Верификация теоретических результатов выполнена на разработанных и изготовленных тестовых металлических образцах с неоднородностями в виде пазов, изготовленных электроэррозионным методом, и трещин в сварных швах. По результатам выполнения работы для некоторых моделей трещин можно детально рассматривать ранее мало изученные физико-математические модели взаимодействия упругих волн мегагерцового диапазона продольного, поперечного и Релеевского типа с нарушениями структуры материалов и сварных швов. На этой основе в работе проведено исследование ряда тонких особенностей выявления дефектов в металлах, пластмассах, сварных швах, и предложены новые подходы к совершенствованию методов выявления и идентификации дефектов. В том числе детализированы некоторые особенности и различия рассеяния ультразвука на плоских и объемных дефектах [2].

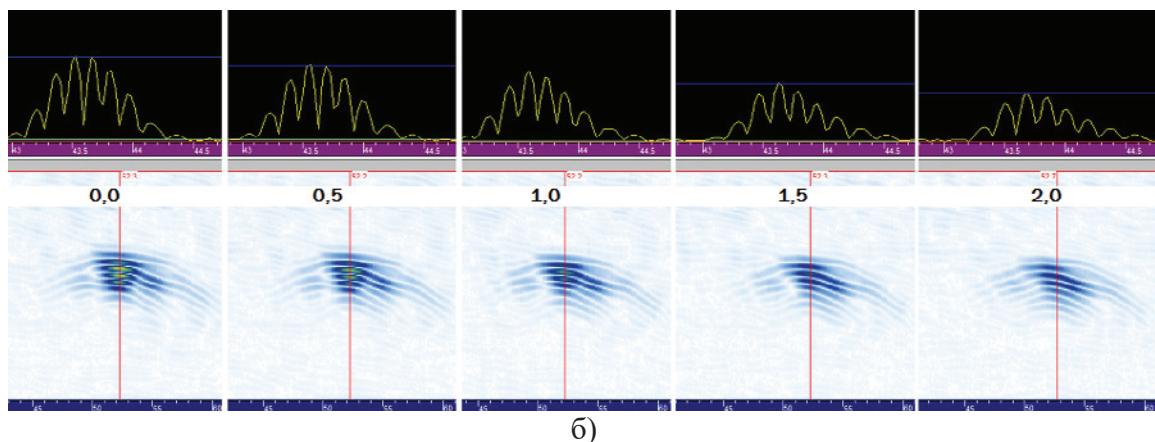


Рис. 2. К изменению изображения модельного дефекта при смещении осей источник-приемника ультразвука и дефекта от 0,0 до 2,0 мм

Эти эффекты оказываются очень важными и должны быть учтены при разработке технологии ультразвукового контроля, в частности – при измерении формы и размеров дефектов

Полученные результаты позволяют проводить моделирование процесса рассеяния ультразвука на дефектах в упругих средах применительно к различным современным материалам, таким как анизотропные материалы, полученные в ходе выращивания изделий с применением аддитивных технологий, современные стали, полиэтилены и прочее. Это позволит повысить достоверность выявления и оценки размеров дефектов при неразрушающем контроле сплошности структуры, что несомненно актуально для ускорения процесса внедрения новых современных материалов и технологий в реальные сектора экономики.

1. Алешин Н.П., Кириллов А.А., Могильнер Л.Ю., Савелова Е.П., Общее решение задачи рассеяния упругих волн на плоской трещине. // Доклады российской Академии наук. 2021. Том 499. С. 58 – 65.
2. Алешин Н.П., Могильнер Л.Ю., Щипаков Н.А., Кусый А.Г., Тиштин В.В., Дегтярев М.Н. Об использовании пазов для моделирования трещин при ультразвуковой дефектоскопии // Дефектоскопия. Принята в печать 24.12.2021, Алешин Н.П., Крысько Н.В., Могильнер Л.Ю., Придеин О.А., Идрисов М.Т. Ультразвуковой контроль сварных соединений стенки РВС – выявление трещин // Нефтяное хозяйство, 2021. Принята в печать 14.12.2021

## НОВЫЙ ЖАРОПРОЧНЫЙ МОЛИБДЕННЫЙ СПЛАВ

**М.И. Карпов с соавт.**

*Институт физики твердого тела Российской академии наук совместно  
с Институтом металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН  
и ОАО «Композит»*

Разработан новый жаропрочный сплав на основе молибдена, способный выдерживать нагрузку в 300 МПа при температуре 1600 °С. Отличительной особенностью сплава является высокая чистота по наиболее вредной примеси – кислороду.

Исходной заготовкой при изготовлении продукции является слиток, получаемый методом последовательного проведения вакуумной электронно-лучевой и вакуумной электродуговой плавки. Производство продукции из сплава осуществляется классическими методами обработки давлением и термообработки. Возможно также получение гранул для последующего применения в аддитивных технологиях.

Молибден и его сплавы находят широкое применение как конструкционный материал в аэрокосмической, электронной промышленности, ядерной энергетике. В настоящее время, в связи с разработкой нового поколения атомных реакторов, в том числе космического базирования, развитием гиперзвуковой авиационной и космической техники возникла необходимость в разработке новых жаропрочных сплавов с повышенными характеристиками прочности при температурах 1600 °С и выше. Наиболее перспективными для этих целей являются сплавы на основе молибдена. Их плотность существенно ниже, чем у сплавов на основе tantalа и вольфрама, что важно для авиационной и космической техники. Применение плавильных технологий для производства изделий из них, благодаря высокой чистоте получаемых слитков по кислороду и специальному легированию, позволяют получать материал, обладающий высокой пластичностью при комнатной температуре. Высокая чистота по кислороду позволяет также применять электронно-лучевую или лазерную сварку при изготовлении изделий. Опытные партии изделий из нового сплава выпускаются на опытно-промышленной базе ИФТТ РАН и поставляются в ОАО «Композит» для проведения испытаний.

В таблице 1. Представлены данные о механических свойствах нового сплава в сравнении со свойствами известного сплава ТСМ-7с при трех температурах испытания.

Таблица 1.

Номер сплава	Предел прочность при температурах, МПа				Остаточное удлинение, %			
	20 °C	1250 °C	1450 °C	1600 °C	20 °C	1250 °C	1450 °C	1600 °C
Новый сплав	690	370	341	285*	18	17,5	21,5	25*
TCM-7с	-	-	100	-	-	-	27	

\*— Данные определены методом экстраполяции

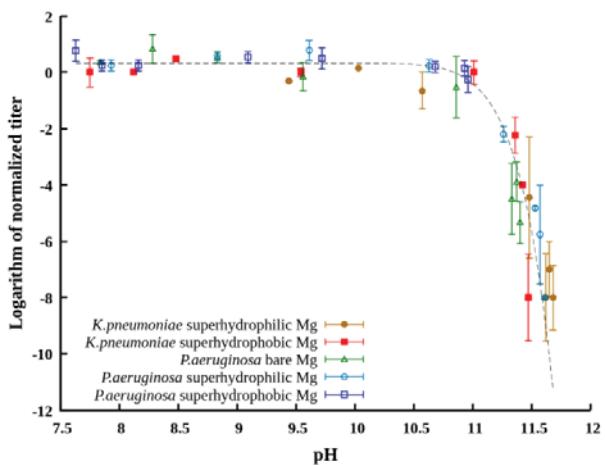
## ИССЛЕДОВАНИЕ БИОКОРРОЗИИ ЛАЗЕРНО-ТЕКСТУРИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ МАГНИЕВОГО СПЛАВА МА8 С СУПЕРГИДРОФИЛЬНЫМИ И СУПЕРГИДРОФОБНЫМИ СВОЙСТВАМИ В РАЗЛИЧНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ.

Л.Б. Бойнович, А.М. Емельяненко

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

Разработаны простые и эффективные методы получения магниевых сплавов с иерархически текстурированной поверхностью, основанные на лазерных методах текстурирования. Предложен подход к получению металлических материалов с градиентом свойств вдоль поверхности. На примере магниевого сплава показано, что предложенный подход позволяет получать образцы с градиентом не только морфологии и смачивания поверхности, но и эффективным градиентом защитных свойств поверхностного слоя. Показано, что предложенные методы обработки магниевых сплавов позволяют добиться очень эффективной защиты от атмосферной и электролитной коррозии. При контакте с биологическими жидкостями и бактериальными дисперсиями, защитные свойства разработанных покрытий позволяют значительно понизить скорость деградации материалов, связанной с микробиологически индуцированной коррозией. Микробиологические исследования магниевых поверхностей, контактирующих с дисперсиями патогенных бактерий, привели к обнаружению очень сильной бактерицидной активности магниевых поверхностей с иерархической шероховатостью. При этом, на коротких временах контакта супергидрофильные поверхности показали существенно большую антибактериальную активность, чем супергидрофобные. В то же время, для супергидрофобных поверхностей характерен пролонгированный бактерицидный эффект и сохранение бактериальной чистоты поверхности. Для анализа влияния микробиологически-индуцированной коррозии на антибактериальные свойства полученных микро- и нанотекстурированных поверхностей исследована корреляция между выживанием клеток бактериальных дисперсий *P. Aeruginosa*, *E. coli* и *Klebsiella B-811* и эволюцией свойств, как поверхности, так и бактериальной суспензии, при их длительном контакте.

Обнаружено, что для поверхностей магниевого сплава с различным характером смачивания, от супергидрофильных до супергидрофобных, скорость деконтаминации бактериальной среды от времени описывается единой зависимостью (Рис. 1. В легенде указаны названия бактериальных сред, для которых получены данные. Пунктирная линия описывает поведение бактериального титра в различных исследованных средах и имеет характер «мастер-кривой»).



**Рис. 1.** Зависимость титра бактериальной дисперсии, контактировавшей с магниевым сплавом MA8 с различным смачиванием поверхности, от pH дисперсионной среды.

Сформулированы механизмы эффективной бактерицидной активности текстурированных сплавов магния в средах с патогенными бактериями.

- Emelyanenko, A.M.; Domantovsky, A.G.; Kaminsky, V.V.; Pytskii, I.S.; Emelyanenko, K.A.; Boinovich, L.B. The Mechanisms of Antibacterial Activity of Magnesium Alloys with Extreme Wettability. // Materials 2021, 14(18), 5454. (Q1) <https://doi.org/10.3390/ma14185454>
- Emelyanenko A.M., Kaminsky V.V., Pytskii I.S., Emelyanenko K.A., Domantovsky A.G., Chulkova E.V., Aleshkin A.V., Boinovich L.B. Antimicrobial activity and degradation of superhydrophobic magnesium substrates in bacterial media. // Metals 2021, 11(7), 1100. <https://doi.org/10.3390/met11071100> (Q1)
- Б.В. Каминский, А.М. Емельяненко, А.В. Алешкин, К.А. Емельяненко, Л.Б. Бойнович. Эффективность и механизмы бактерицидного действия на *Escherichia coli* супергидрофильной поверхности магниевого сплава. // Микробиология. Том: 90 Номер: 5 Год: 2021 Страницы: 613-617. DOI: 10.31857/S0026365621050098
- Kirill A. Emelyanenko, Alexander G. Domantovsky, Elizaveta V. Chulkova, Alexandre M. Emelyanenko, Ludmila B. Boinovich. Thermally induced gradient of properties on a superhydrophobic magnesium alloy surface. Metals, 11 (2021), 41. <https://doi.org/10.3390/met11010041>

## КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ АГРЕГАЦИИ

**И.В. Мелихов, В.В. Веденяпин, С.З. Аджиев**

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова*

Завершена разработка нового метода поиска воздействий на частицы исходного вещества (ИВ), приводящих к их превращению в частицы материала нового поколения (МНП) при минимальных энергозатратах. При использовании этого метода каждое воздействие на частицы ИВ и МНП сопровождают многократными измерениями тех изменений, которые внесло данное воздействие в состояние частиц. Если же измерения удаётся сделать кратковременными и следующими друг за другом при определённом временном интервале между ними, то результаты измерений объединяют в частотные функции, характеризующие влияние воздействий на свойства частиц. В отчётом году частотные функции, характеризующие превращение ряда исходных веществ в МНП, были определены с достаточной точностью и представлены в виде кинетических уравнений, описывающие процессы, приводящие к этому превращению. Эти уравнения были сопоставлены с описаниями указанных процессов в фундаментальной науке, что привело к выводу, что комплекс таких уравнений будет способствовать решению ряда теоретических и приклад-

ных задач. Исследования показали, что привлечение упомянутых частотных функций к решению этих задач вполне реализуемо и перспективно. В отчётом году было доказано, что такие частотные функции целесообразно использовать при поиске воздействий на частицы ИВ и МНП, приводящих к заданным изменениям их свойств при минимальных энергозатратах. В частности, установлено, что частотные функции ниосом, введённых в терmostатированный сосуд, существенно зависят от его температуры (рис. 1). Эти функции были определены с точностью, достаточной для выявления влияния температуры на свойства ниосом и определения температуры, при которой можно изменить их в нужной степени. Показано также, что термическое воздействие на пересыщенный раствор карбоната кальция, приводящее к его охлаждению, настолько замедлит агрегацию в растворе, что появится возможность исследования протекающих там атомно-молекулярных процессов. Учитывая это, можно утверждать, что в отчётом году была завершена разработка нового метода изучения дисперсных систем, возможность разнообразного использования которого очевидна.

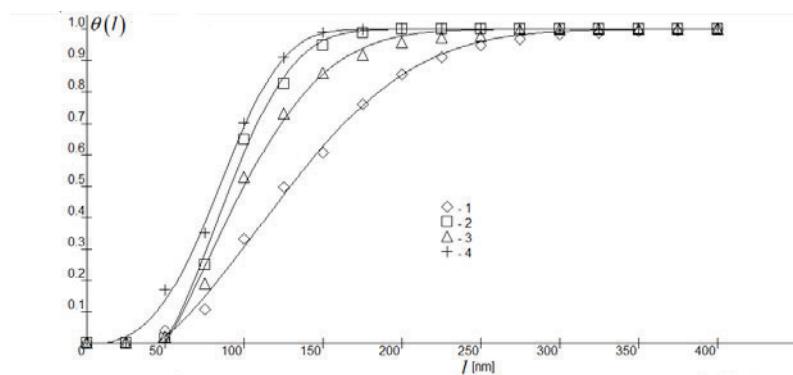


Рис. 1.

Некоторые детали описания этого метода приведены в статьях:

1. И.В. Мелихов, В.В. Веденяпин, С.З. Аджиев «Подходы к оптимизированному математическому обеспечению исследований, приводящих к созданию материалов нового поколения». Статья принята к публикации в журнале «Неорганические материалы».
2. С.З. Аджиев, В.В. Веденяпин, И.В. Мелихов «Кинетические модели агрегации, приводящей к морфологической памяти образовавшихся структур». Статья опубликована в ЖВМиМФ. 2022, Т. 62, № 2, С. 255–269.
3. И.В. Мелихов, В.В. Веденяпин, С.З. Аджиев, Я.Г. Батищева «Математическое обеспечение кинетики превращения атомно-молекулярных агрегатов в макроскопические тела при минимальных затратах энергии». Статья опубликована в трудах XXII Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам, М.: 2021, С. 526–528.

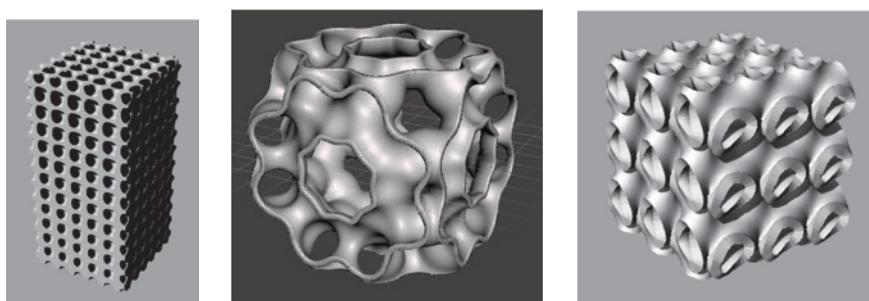
## МАТЕРИАЛЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ С РЕГУЛЯРНОЙ (ПЕРИОДИЧЕСКОЙ) МИКРОСТРУКТУРОЙ

**В.Я. Шевченко, М.М. Сычев, С.Н. Перевислов, М.Ю. Арсентьев,  
А.С. Долгин, С.В. Балабанов, А.И. Макогон**  
*Институт химии силикатов им. И.В. Гребеницкова РАН,  
НИЦ «Курчатовский институт» - ЦНИИ КМ «Прометей»*

Осуществлено комплексное экспериментально-теоретическое исследование процессов создания конструкционных и функциональных сотовых материалов с управляемой упорядоченной трижды периодической структурой. Показано, что объекты с топологией трижды периодических поверхностей минимальной энергии (ТППМЭ), изготовленные с помощью аддитив-

ных технологий из металла, керамики и полимеров, оптимальным образом рассеивают механическую энергию. Разработан метод генерации геометрий типа Алмаз, Невиус, Примитив Шварца, Гироид и др. с требуемым для 3D печати разрешением, их сочетаний (гибридов), градиентных структур, а также новых топологий с использованием программы TOPOS (см. рисунок). Разработаны аддитивные технологии и материалы для 3D печати, изготовлены и испытаны изделия из металла (сталь, алюминиевые сплавы), керамики (алмаз-карбид-кремниевый композит Идеал, карбид кремния, корунд), пластика и композитов (стеклопластик, полиамид, поликарбонаты, полилактид). Показано, что механические свойства трижды периодических материалов определяются совокупностью характеристик их скелетных графов; в отличие от классических сотовых структур они обладают высокой изотропией механических свойств.

Установлено, что материалы эффективны для создания бронезащиты, энергопоглощающих защитных экранов, снижения акустической заметности подводных лодок, изготовления корабельных переборок и других изделий ВВСТ и гражданского назначения. Практическая реализация результатов работы проводится в сотрудничестве с ЦНИИ КМ «Прометей», НПО «Специальные материалы».



1. Shevchenko V.Ya. Makogon A.I., Sychov M.M. Modeling of reaction-diffusion processes of synthesis of materials with regular (periodic) microstructure. // Open Ceramics. 2021. V. 6. P. 100088. DOI: 10.1016/j.oceram.2021.100088.
2. Shevchenko V.Ya., Kovalchuk M.V., Oryshchenko A.S., Perevislov S.N. New chemical technologies based on Turing reaction–diffusion processes. // Doklady Chemistry. 2021. V. 496. № 2. P. 28-31. DOI: 10.1134/S0012500821020038.
3. Shevchenko V.Ya. Perevislov S.N., Ugolkov V.L. Physicochemical interaction processes in the carbon (diamond)–silicon system. // Glass Physics and Chemistry. 2021. V. 47, № 3. P. 197-208. DOI: 10.1134/S108765962103010X.
4. Шевченко В.Я., Перевислов С.Н. Реакционно-диффузионный механизм синтеза в системе алмаз–карбид кремния. // Журнал неорганической химии. 2021. Т. 66. № 8. С. 994-1001. DOI: 10.1134/S003602362108026X.
5. Сильников М.В., Шевченко В.Я., Михайлин А.И., Перевислов С.Н., Сильников Н.М. Композитные органокерамические панели для защиты от пуль калибра 7,62 мм и 5,45 мм с термоупрочненным сердечником на основе керамики алмаз – карбид кремния с регулируемой взаимосвязанной структурой. // Известия Российской академии ракетных и артиллерийских наук. 2021. № 3(118). С. 107-113.
6. Shevchenko V.Ya., Oryshchenko A.S., Perevislov S.N. and Sil'nikov M.V. Sound waves could be the secret to better armour // Springer Nature. 24 ноября 2021 г.

## СОЗДАНИЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ОСНОВ ТЕХНОЛОГИЙ ПОЛУЧЕНИЯ СТРУКТУР С РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНЬЮ УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ НЕОРГАНИЧЕСКИХ И ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ДЛЯ УСТРОЙСТВ ФОТОНИКИ И ЭЛЕКТРОНИКИ

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

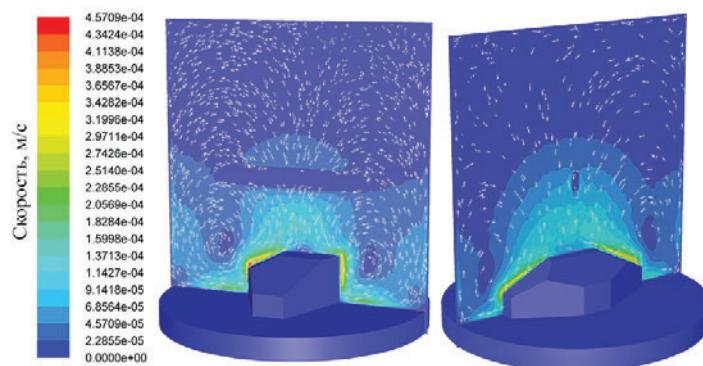
Реализован метод очистки твердого триоксида молибдена вакуумной возгонкой в условиях регулируемого парциального давления кислорода и с химическим связыванием остаточного вольфрама. Экспериментальная оптимизация параметров на основе

численного моделирования позволила очистить кристаллический  $\alpha$ - $\text{MoO}_3$  до уровня 99,999 мас.% и лучше учесть 65 примесных элементов.

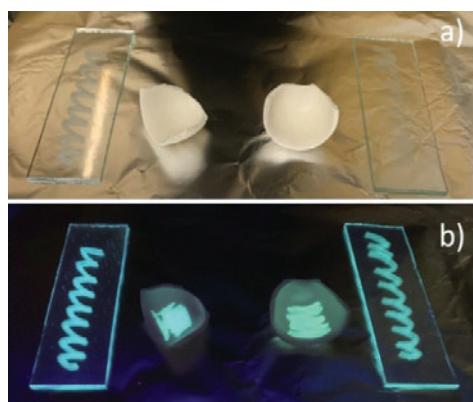
Установлено, что использование высокочистого  $\alpha$ - $\text{MoO}_3$  с избытком кислорода относительно стехиометрического состава позволяет значительно улучшить качество кристаллов, выращиваемых методом TopSeedSolutionGrowth (LBO,  $\text{BPO}_4$ ), и методом Чохральского ( $\text{NaLa}(\text{MoO}_4)_2$ ) за счет снижения уровня концентрации примесей. В частности, уменьшается растворение материала платинового тигля в расплаве и уменьшается роль примесей в образовании из них атомарных дефектов. Снижение плотности дислокаций в кристаллах LBO происходит с (38-42) до (10-15)  $\text{cm}^{-3}$ , а оптического поглощения лазерного излучения снижается с (10-20) до (2-5) ppm/ $\text{cm}$ . Использование очищенного материала также позволяет использовать расплав в большем количестве циклов роста, что, в свою очередь, повышает экономическую эффективность процесса.



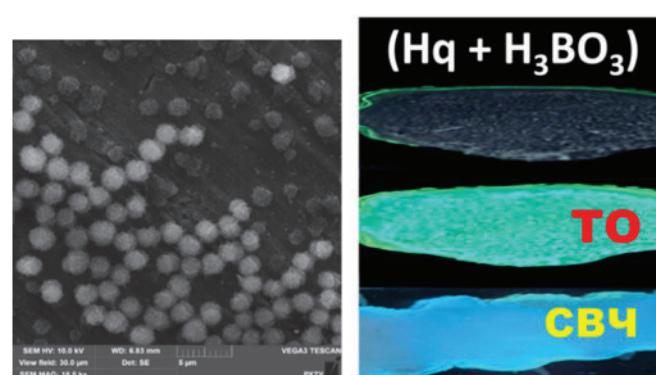
**Рис. 1.** Фотографии монокристалла LBO, выращенных на на высокочистом насыщенном кислородом  $\text{MoO}_3$  без дефектов



**Рис. 2.** Скорость потоков  $\text{K}_2\text{Co}(\text{SO}_4)_2$  при скорости роста кристалла 0,5 мм/сут (при пересыщении, равном 20 масс. %)



**Рис. 3.** Фотографии пленок ГМ, изготовленных из  $(\text{CaF}_2 + \text{Li})$  4% (слева) и 5% (справа), нанесенных на стеклянные пластины и корундовую керамику при естественном (а) и УФ ( $\lambda_{\text{возб}} = 365$  нм) освещении (б)



**Рис. 4.** СЭМ изображение и фотография пленок ГМ под УФ облучением после температурной и СВЧ активации

Показано, что даже для наноразмерных OLED-структур повышение химической чистоты препарата MoO<sub>3</sub> с 99,98% до 99,999% по массе приводит к значительному улучшению электролюминесцентных характеристик OLED.

В рамках работ по совершенствованию технологии кристаллов солей Туттона (на примере K<sub>2</sub>Co(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>\*6H<sub>2</sub>O), используемых в качестве фильтров в приборах «солнечно слепого» диапазона проведен численный 3D анализ процесса тепломассопереноса в растворе. По результатам численного моделирования установлено температурное распределения в кристаллизаторе в зависимости от различных факторов. Проведен оценочный расчет пересыщения внутри объема маточного раствора с учетом поглощения вещества кристаллом. Результаты численного моделирования положены в основу разработки ЭКД на ростовую установку с возможностью контроля массопереноса в жидкой фазе посредством организации вынужденных вибрационных потоков. В рамках этого же направления отработана методика снижения суммарной концентрации примесей в исходном сульфате кобальта до величины 10<sup>-3</sup> мас% по 62 примесным элементам.

По направлению люминесцентные гибридные органо-неорганические материалы (ГМ) разработана оригинальная методика получения пленочных люминесцентных ГМ за счет проведения обменной реакции между высокочистыми неорганической матрицей и органическим компонентом непосредственно в пленке, наносимой на объекты с различной шероховатостью поверхности.

## **СОЗДАНИЕ ВЫСОКОТЕХНОЛОГИЧНОГО ПРОИЗВОДСТВА СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ СТЕКОЛ, ИМПОРТОЗАМЕЩАЮЩИХ СТЕКЛОНАПОЛНИТЕЛЕЙ И ЭКСПОРТНО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ МЕДИЦИНСКИХ ИЗДЕЛИЙ НА ИХ ОСНОВЕ**

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

На данный момент в России отсутствует производство современных стоматологических материалов, а зарубежные аналоги характеризуются не только неоправданно высокой стоимостью, но не являются универсальными и не решают широкого спектра медицинских проблем. Внедрение в производство передовых технологий и современного оборудования, введение новых линий по производству современных медицинских стоматологических изделий, содержащих специализированные стеклонаполнители нового поколения, позволит создать высокотехнологичное производство специализированного стекла и конкурентоспособных стоматологических медицинских изделий для России, а так же расширить рынки сбыта в странах ближнего и дальнего зарубежья: Белоруссия, Украина, Узбекистан, Туркменистан, Грузия, Армения, Азербайджан, Молдова, Румыния, Казахстан, Латвия, Иордания.

В РХТУ им. Д.И. Менделеева начата разработка синтеза специализированных стекол с применением методов оптического стекловарения для использования в стоматологических композитных материалах и стеклоиономерных цементах, разработка стеклообразных и стеклокристаллических наполнителей и планируется внедрение в производство указанных наполнителей, а также медицинских стоматологических изделий на их основе. В 2021 году определена область оптимальных составов прозрачных стекол для наполнения стеклоиономерных цементов и композитных материалов. Предложенные стекла отличаются повышенной химической стойкостью, рентгеноконтрастностью, улучшенными механическими и эстетическими характеристиками. Определены главные технологические параметры их синтеза: температура загрузки шихты, скорость подъема температуры, температура и длительность осветления стекломассы, температура выработки.



**Рис.** Синтез стекла в газовой горшковой печи и полученный гранулят

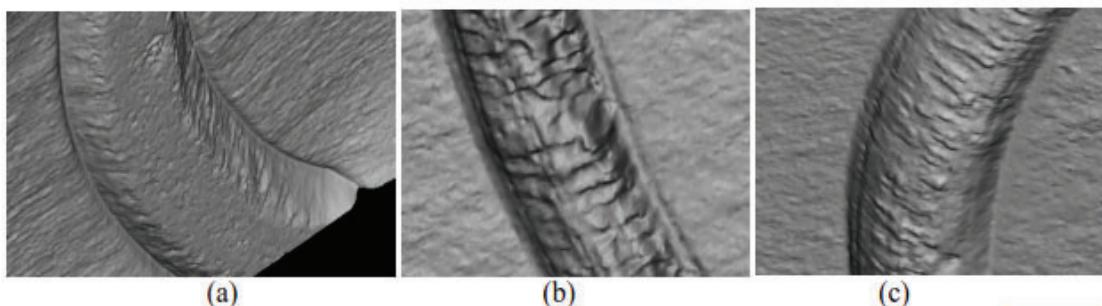
Выполнение проекта позволит не только преодолеть импортозависимость отечественных производителей стоматологических препаратов от поставок порошковых стекол для иономерных цементов, но и создать экспортно-ориентированное производство новых стоматологических материалов для граждан России и стран ближнего и дальнего зарубежья, что полностью соответствует Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации в части создания новых материалов медицинского назначения.

## СУПЕРКОНСТРУКЦИОННЫЕ ПЛАСТИКИ И КОМПОЗИТЫ НА ИХ ОСНОВЕ

С.Ю. Хаширова с сотр.

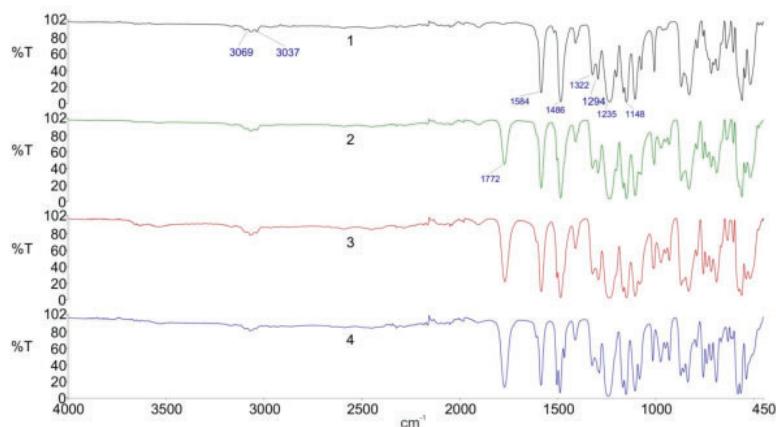
*Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова*

Проведено сравнительное исследование образцов полиэфирэфиркетонов (ПЭЭК) с различной вязкостью, синтезированных в КБГУ, на трение и износ. Обнаружена зависимость силы трения от скорости скольжения. С повышением вязкости полимера абразивный износ полимера снижается.

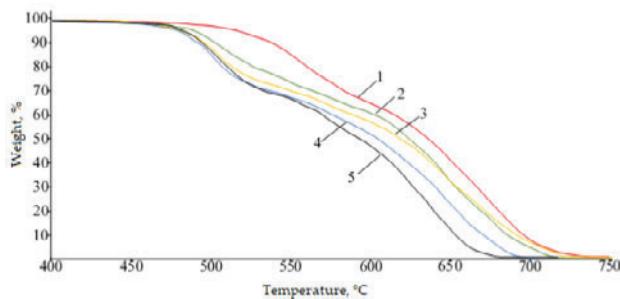


**Рис. 1.** Следы износа для образцов PEEK с ПТР = 10 (а), ПТР = 25 (б) и ПТР = 75 (с)

Получен и исследован ряд новых сополифениленсульфонов с кардоческими фрагментами. Выявлено влияние содержания кардоческих фрагментов на температуру стеклования, теплостойкость, упруго-прочностные свойства сополимеров.



**Рис. 2.** ИК-спектры: 1- PPSU, 2- PPSU-C-30,  
3- PPSU-C-50, 4 - PPSU –C-100



**Рис. 3.** Кривые ТГА: 1- PPSU, 2- PPSU-C-30,  
3- PPSU-C-50, 4 - PPSU –C-70, 5 - PPSU –C-100

Разработана технология переработки использованных медицинских масок в суперконцентраты для получения композиционных материалов с повышенными эксплуатационными свойствами. Применение технологии способно решить проблему накопления большого количества использованных медицинских масок в период пандемии с получением практически ценных полимерных продуктов.



**Рис. 4.** Медицинские маски (а); суперконцентрат на основе медицинских масок (б).

1. Friction and Wear of Polyetheretherketone Samples With Different Melt Flow Indices. J. Tribol. Dec. 2021, 144(6): 061705 (7 pages). doi.org/10.1115/1.4053092.
2. Synthesis and Properties of Copolyphenylene Sulphones with Cardo Fragments. Polymers 2021, 13, 3689. <https://doi.org/10.3390/polym13213689>.
3. Заявка на изобретение РФ №2021105711 от 05.03.2021 г.
4. Research on the Possibility of Recycling Medical Masks and their Use as Polymer Additives. Key Engineering Materials. ISSN: 1662-9795, Vol. 899, pp 434–439. doi:10.4028/www.scientific.net/KEM.899.434

## НОВОЕ СЕМЕЙСТВО СОПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК ИЗ РАЗРУШАЕМЫХ МИКРОБНЫХ ПОЛИГИДРОКСИАЛКАНОАТОВ

Е. Шишацкая, Е. Дудаев, Н. Лукьяненко, И. Немцев, А. Голубев, Т. Волова  
*Институт биофизики СО РАН*

Полигидроксиалканоаты (ПГА) – разрушаемые термопласти микробиологического происхождения, т.н. «зеленые» биопластики. Свойства ПГА (устойчивость к УФ-лучам, отсутствие гидролиза в жидких средах, термопластичность) в сочетании с биоразрушаемостью и высокой биологической совместимостью выдвигают эти биополимеры в разряд наиболее перспективных материалов XXI века для применения в различных сферах, – от коммунального и сельского хозяйства до фармакологии и биомедицины. Самый распространенный представитель ПГА – это гомополимер 3-гидроксимасляной кислоты (поли-3-гидроксибутират, (ПЗГБ). В силу высоких кристалличности (свыше 70%) и гидрофобности его применение не свободно от негативных моментов, среди которых неупорядоченная кристаллизация, трудности переработки в изделия, которые характеризуются низкой ударной прочностью и «старятся» во времени. Для улучшения свойств П(ЗГБ) возможно применение биологических, химических и физических методов, среди которых – получения композитов П(ЗГБ) с различными материалами, синтез сополимерных ПГА, химическая или физическая модификация поверхности полимерных изделий.

Лазерная обработка позволяет избирательно модифицировать поверхность изделий без разрушения материала и образования токсичных продуктов. Лазерная абляция рассматривается в качестве эффективного метода формирования микро- и наноструктур на поверхностях изделий из различных материалов, включая полимеры.

В ИБФ СО РАН в 2021 г. первые выполнена модификация поверхности полимерных пленок из биоразрушаемых микробных полигидроксиалканоатов различного химического состава лазерной обработкой в различных режимах облучения; исследовано влияние режима излучения на микроструктуру, свойства поверхности и биологические свойства полимерных пленок в зависимости от набора и соотношения мономеров.

Получены пионерные результаты использования CO<sub>2</sub>-лазера Laser Pro Explorer II в непрерывном и квазиймпульсном режимах обработки пленок из четырех типов ПГА: поли-3-гидроксибутират и трех типов сополимеров 3-гидроксибутират: с 4-гидроксибутиратом или 3-гидроксивалератом, или 3-гидроксигексаноатом. Для каждого режима облучения выявлены отличия последствий обработки в зависимости от типа ПГА. Показано значительное влияние лазерной обработки на микроструктуру и параметры шероховатости поверхности пленок. Непрерывное излучение вызывает образование дефектов в виде оплавленных бороздок, совокупная площадь которых возрастет у менее термостабильных сополимерных пленок. Обработка в квазиймпульсном режиме сопровождается образованием дефектов в виде лунок без выраженных оплавленных участков на фоне значительного уменьшения краевого угла смачивания водой и увеличение шероховатости поверхности образцов. На примере культуры фибробластов мыши линии NIH 3T3 с использованием флюоресцентного окрашивания DAPI (маркер ядерной ДНК) и колориметрического теста

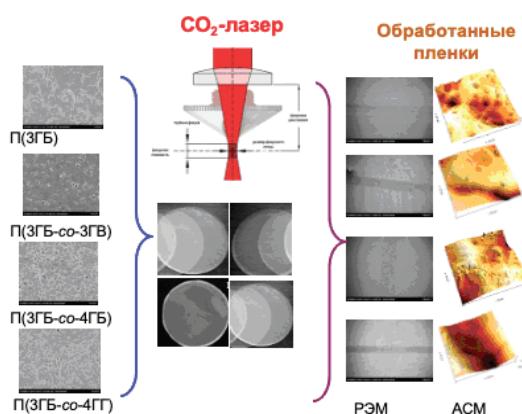
метаболической активности клеток (МТТ-тест) показано, что наиболее благоприятны для выращивания клеток сополимерные пленки, содержащие мономеры 3-гидроксигексаноата и 4-гидроксибутират, имеющие самые низкие значения степени кристалличности, обработанные в квазимпульсном режиме. Показано, что режимом CO<sub>2</sub>-лазерной обработки можно влиять на адгезионные свойства поверхности полимерных пленок из ПГА, включая пролиферацию эукариотных клеток.



## Институт биофизики СО РАН ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН»

### Создание функциональных материалов

Авторы: Е. Шишацкая, Е. Дудаев, Н. Лукьяненко, И. Немцев, А. Голубев, Т. Волова



Получено не имеющее аналогов семейство сополимерных пленок из разрушаемых микробных полигидроксилканоатов (ПГА) различного состава, обработанных CO<sub>2</sub>-лазером в двух режимах: при постоянном облучении векторными линиями и квазимпульсным режимом растровым методом при варьировании скорости и мощности излучения 3,0-13,5 Вт. Для каждого режима выявлены отличия модификации поверхности пленок в зависимости от состава полимеров и режима облучения. Найдены условия, позволяющие направленно модифицировать полимерную поверхность, включая гидрофильность, пористость, шероховатость, адгезионные свойства. Результаты позволяют направленно влиять на прикрепляемость и пролиферацию эукариотных клеток, - стимулировать развитие клеточных культур при использовании пленок в качестве скаффолдов в клеточных технологиях или ограничивать развития микробного обраствания в случае упаковки пищевых продуктов.

На основе анализа полученных результатов предложен алгоритм направленного синтеза и физической модификации ПГА для получения функциональных разрушаемых полимерных материалов заданного состава с заданными характеристиками поверхности, пригодные для конструирования изделий биомедицинского назначения и разрушающей упаковки.

1. T. Volova, A. Golubev, I. Nemtsev, A. Lukyanenko, A. Dudaev, E. Shishatskaya. Laser processing of polymer films from PHAs different contents. // Polymers – 2021 – Vol.13 (10). P – 1553-1578 <https://doi.org/10.3390/polym13101553>
2. T. Volova, E. Kiselev, I. Nemtsev, A. Lukyanenko, A. Sukovaty, A. Kuzmin, G. Ryltseva, E. Shishatskaya. Properties of degradable PHAs with different monomer compositions. Int Biol Macromol. 2021 Vol. 182 – P. 98-114 <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2021.04.008>.
3. E. Shishatskaya, I. Nemtsev, A. Lukyanenko, A. Vasiliev, E. Kiselev, A. Sukovaty, T. Volova, Polymer Films of Poly-3-hydroxybutyrate Synthesized by *Cupriavidus necator* from Different Carbon Sources, J. Polym. Environ. (2021) Vol. 29(3) – P. 837–850. <https://doi.org/10.1007/s10924-020-01924-3>.
4. N. Zhila, K. Sapozhnikova, E. Kiselev, A. Vasiliev, I. Nemtsev, E. Shishatskaya, T. Volova. Properties of degradable polyhydroxyalkanoates (PHA) synthesized by a new strain of *Cupriavidus necator* IBP-21 on various C-substrates// Polymers – 2021 – Vol.13(18),3142. <https://doi.org/10.3390/polym13183142>
5. Prudnikova, S. V., Evgrafova, S. Y., Volova, T. G. Metabolic activity of cryogenic soils of the subarctic zone Siberia towards "green" bioplastics // Chemosphere. – 2021. – Vol. 263. – P.128180 <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.128180>
6. T.G. Volova, E.G. Kiselev, A.V. Demidenko, E.I. Shishatskaya Sabu Thomas «Biodegradable PHAs – promising “green” bioplastics and possible ways to increase their availability» - глава в монографии «Emerging Trends in Polymeric Materials’, Synthesis, Application, and

## 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 сотр.

НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ

Целью работы является исследование возможности создания новых нанокомпозиционных материалов на основе полиолефинов и наноразмерного волокна оксида алюминия Nafen для FDM-печати. Предлагаемый метод получения состоит в *in situ* полимеризации с аппретированием волокна, что обеспечивает как оптимальное распределение наноразмерного армирующего наполнителя в полимерной матрице так и взаимодействие «(nano)наполнитель–матрица». Данный подход перспективен для создания нанокомпозиционных материалов, обладающих низкой степенью термической усадки, пригодных для переработки методом FDM-печати.

Полукристаллические термопласти, такие как полиамид (нейлон), полипропилен (ПП), полиэтилен (ПЭ), не получили широкого распространения в 3D-печати, поскольку имеют большие значения усадки (от 1,5 до 5,0 %). В результате высокой термической усадки и внутренних напряжений, а также вследствие низкой адгезии термопласта к основанию стола 3D-принтера во время печати происходят деформация изделия и отслаивание детали, что увеличивает количество брака и, как следствие, повышает расход материала в пересчете на одно изделие. Одним из способов, предлагаемых в современных зарубежных публикациях для решения проблемы усадки и снижения внутренних напряжений, является наполнение пластиков, в частности полиолефинов, как изотропными, так и волокнистыми наполнителями.

Для решения данной проблемы:

- разработаны лабораторные методики синтеза нанокомпозиционных материалов на основе сополимеров этилена с пропиленом (Э/П) и этилена с гексеном-1 (Э/Г-1) и наноразмерного волокна  $\text{Al}_2\text{O}_3$  методом *in situ* полимеризации с аппретированием волокна;
- разработана лабораторная методика функционализации нановолокон Нафен олеиновой кислотой (Нафен ОК) и получения филамента нанокомпозиционного материала ПВД/Нафен ОК;
- проведены исследования теплофизических и реологических свойств полученных нанокомпозиционных материалов.

В качестве наиболее перспективного материала для переработки способом FDM-печати выбран нанокомпозиционный материал Э/Г-1/Нафен OS, экструдированный при температуре 175 °C. Установлено, что повышение температуры сопла принтера приводит к уменьшению эффекта коробления ПВД и увеличению относительного удлинения при печати на «холодном» столе, а увеличение температуры экструзии – к изменению реологических характеристик полиэтилена, аналогичных для композиции Э/Г-1/Нафен AllylS при действии повышенных температур. Показано, что модификация ПВД волокнами позволяет получить детали без искажения контура и коробления. Прочность нанокомпозиционного материала (15 % (по массе) Нафена ОК) при растяжении составляет  $8,2 \pm 0,45$  МПа, относительное удлинение  $198 \pm 18,1$  % (прочность немодифицированного ПВД  $9,3 \pm 1,12$  МПа, относительное удлинение  $165 \pm 24,5$  %). Установлено, что при FDM-печати нанокомпозиционного материала на основе сополимера Э/Г-1 и Нафена OS снижение температуры сопла принтера при экструзии образца с 260 до 200 °C практически не

влияет на коробление детали. Прочность модифицированного сополимера (содержание аппретированного волокна 0,8 %), полученного способом FDM-печати, составляет  $19,75 \pm 1,76$  МПа, относительное удлинение  $482 \pm 30,1$  %.



**Рис. 1.** Фотография напечатанных образцов полиэтилена: верхний – исходный материал, средний – модифицированный волокнами Нафен, нижний – модифицированный нановолокном Нафен, функционализированный олеиновой кислотой

В результате работы разработан новый нанокомпозиционный материал на основе сополимера этилена с гексеном-1 и наноразмерного волокна оксида алюминия Нафен, аппретированного октилсиланом для FDM-печати (рис. 1). Метод *in situ* полимеризации сополимера с аппретированием волокна позволяет получать напечатанные детали с высоким уровнем физико-механических свойств и высоким качеством печати при концентрации волокна Нафен на уровне 0,5 % (по массе). Предлагаемый метод обеспечивает как оптимальное распределение наноразмерного армирующего наполнителя в полимерной матрице, так и взаимодействие «(нано)наполнитель–матрица». Данный подход перспективен для создания нанокомпозиционных материалов, обладающих низкой степенью термической усадки, пригодных для переработки методом FDM-печати.

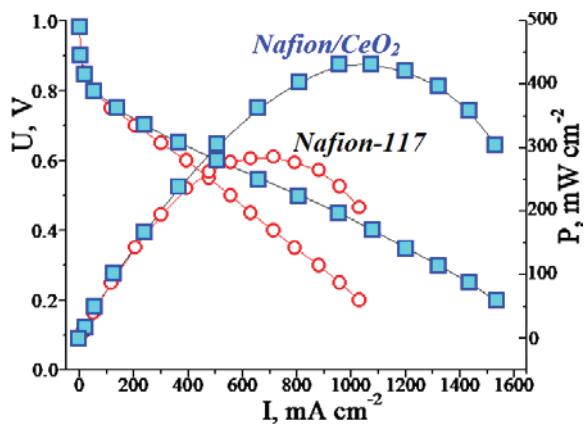
1. Кондрашов С.В., Пыхтин А.А., Ларионов С.А., Сапего Ю.А., Бравая Н.М., Жарков И.В., Саратовских С.Л., Панин А.Л. Исследование возможности использования полиолефинов и сополимеров на их основе для FDM-печати // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2020. № 3. С. 23–32.

## РАЗРАБОТКА ПОЛИМЕРНЫХ ПРОТОНПРОВОДЯЩИХ МЕМБРАН ДЛЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

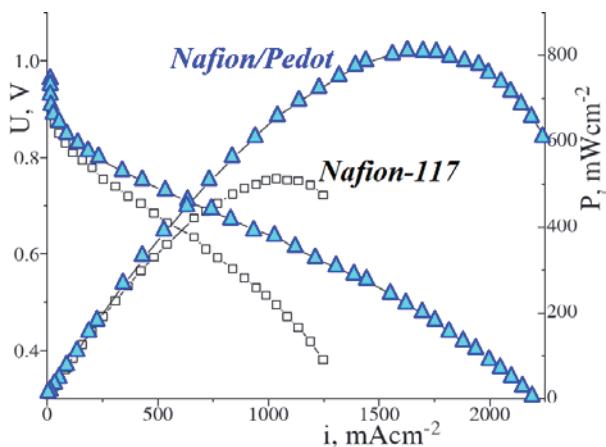
**А.Б. Ярославцев, И.А. Стенина, Д.В. Голубенко**

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН*

Синтезирован и протестирован в водрод–воздушных топливных элементах ряд новых мембран как на основе доминирующих на настоящее время перфторированных сульфакатионитных мембран Nafion, так и привитых мембран на полимерной матрице. При этом преследовались различные цели. Так показано, что мембранны Nafion допированные оксидом церия могут достигать повышенной мощности не только при 100%, но и при пониженной влажности. Кроме того, они проявляют большую стабильность в условиях работы топливных элементов за счет улавливания пероксидных радикалов. Высокая мощность была достигнута для топливных элементов на основе мембран Nafion-117 допированных полимером Pedot.

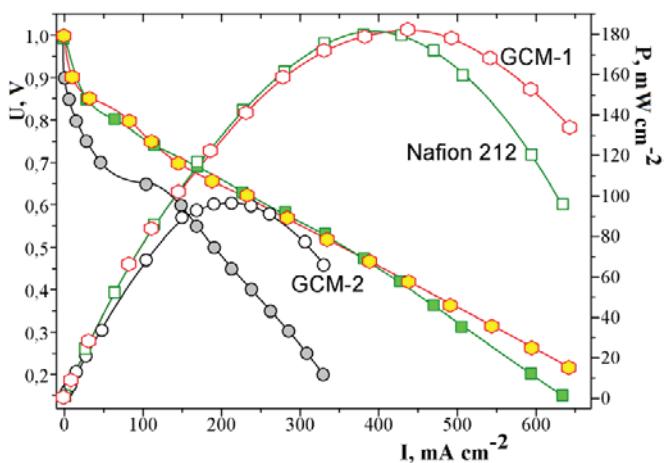


**Рис. 1.** Вольт-амперные и мощностные характеристики топливных элементов на основе мембранны Nafion-117 и Nafion-117 допированной оксидом церия при 60°C и относительной влажности 70%.



**Рис. 2.** Вольт-амперные и мощностные характеристики топливных элементов на основе мембранны Nafion-117 и Nafion-117 допированной Pedot при 65°C и относительной влажности 100%.

Показано, что сопоставимой мощностью с мембранами Nafion в топливном элементе могут характеризоваться и существенно более дешевые привитые мембранны на основе пленки метилпентена.



**Рис. 3.** Вольт-амперные и мощностные характеристики топливных элементов на основе мембранны Nafion-212 и привитых мембранны на основе пленки метилпентена одинаковой толщины с ионообменной емкостью 1,9 и 2,9 мг-экв/г при 30°C и относительной влажности 100%.

---

## ПРИЛОЖЕНИЯ

---

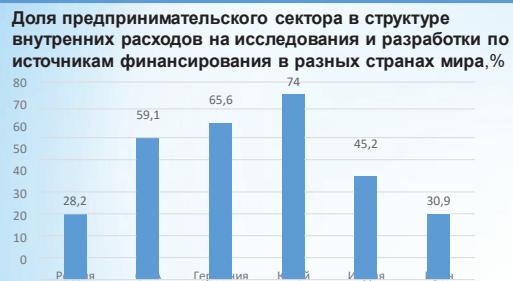
Презентация доклада академика РАН Каляева Игоря Анатольевича  
«О формировании комплексных научно-технических программ полного  
инновационного цикла в области новых материалов»

## О формировании комплексных научно-технических программ полного инновационного цикла в области новых материалов

Председатель Совета по приоритетному направлению  
Стратегии научно-технологического развития Российской  
Федерации «Переход к цифровым, интеллектуальным  
производственным технологиям, роботизированным  
системам, новым материалам и способам конструирования,  
создание систем обработки больших данных, машинного  
обучения и искусственного интеллекта»

Академик РАН И.А. Каляев

### Низкая эффективность сектора исследований и разработок в Российской Федерации



Динамика внутренних затрат в России на исследования и разработки по источникам финансирования (в постоянных ценах 1989 г.)



\* Включая средства бюджета, бюджетные ассигнования на содержание образовательных организаций высшего образования, средства организаций государственного сектора (в том числе собственные).

Доля продукции на мировом рынке высоких технологий

США	- 35 %
Япония	- 20 %
Германия	- 13%
Китай	- 12 %
Южная Корея	- 5 %
Россия	- 0,3 %

### Положение России в мире

Индекс глобальной конкурентности – 43 место

Индекс глобальной инновационности – 45 место

Индекс диверсификации экономики – 45 место

Источник: Индикаторы науки 2016. Статистический сборник. - М.: НИУ ВШЭ, 2016

## Отставание Российской Федерации по уровню патентной активности

**Цифровые технологии:** Россия на 8 месте (доля российских патентов 1,5 %)

**Искусственный интеллект:** Россия на 14 месте (доля российских патентов 0,3 %) - отстает от ведущих стран с огромным отрывом : от Южной Кореи в 31 раз, от Германии в 18 раз, от Тайваня в 17 раз.

**Робототехника:** Россия на 10 месте (доля российских патентов 0,4 %)

**Новые материалы:** Россия на 8 месте (доля российских патентов 3 %)

## Основные сценарии научно-технологического развития РФ



Основными сценариями развития науки и технологий в России до 2035 года являются сценарии, основанные на переходе от энерго-сырьевой модели роста к инновационной (рост за счет человеческого капитала и технологий):  
1) импорт технологий; 2) научно-технологическое лидерство при традиционной специализации экономики; 3) научно-технологическое лидерство с ориентацией на новую экономику



Прогноз динамики производительности труда в России на период до 2035 года. % (2015=100)



Источник: ЦМАКП

## УКАЗ

ПРЕЗИДЕНТА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
о Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации

В соответствии со статьей 18<sup>1</sup> Федерального закона от 28 июня 2014 г. о государственном планировании в Российской Федерации и о статусе главы Российской Федерации

1. Утвердить приватизированную Стратегию научно-технологического развития Российской Федерации.

2. Правительству Российской Федерации:

утвердить в 3-месячный срок по согласованию с президентом Совета при Президенте Российской Федерации по науке и образованию план мероприятий по реализации Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации;

организовать выполнение Стратегии.

3. Рекомендовать органам государственной власти субъектов Российской Федерации руководствоваться положениями Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации при осуществлении своей деятельности в этой сфере, предусмотреть внесение необходимых изменений в государственные программы субъектов Российской Федерации.

4. Настоящий Указ вступает в силу со дня его подписания.



Москва, Кремль  
1 декабря 2016 года  
№ 642



Цель Стратегии -  
обеспечение независимости и  
конкурентоспособности страны за  
счет создания эффективной  
системы наращивания и наиболее  
полного использования  
интеллектуального потенциала  
науки, а также трансформации  
науки и технологий в ключевой  
факторах развития России.



**Советы по приоритетам Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации**  
(утверждены Советом при Президенте РФ по науке и образованию 19 декабря 2017 года и приказом министра науки и ВО №733 от 04.10.2018 )

1. «Переход к высокопродуктивному и экологически чистому агро- и аквакультурству, разработка и внедрение рационального применения средств химической и биологической защиты сельскохозяйственных растений и животных, хранение и эффективная переработка сельскохозяйственной продукции, создание безопасных и качественных, в т.ч. функциональных продуктов питания» (Председатель академик Донник И.М.)
2. «Возможность эффективного ответа российского общества на большие вызовы с учетом взаимодействия человека и природы, человека и технологий, социальных институтов на современном этапе глобального развития, в т.ч. применяя методы гуманистических и социальных наук» (Председатель академик Дынкин А.А.)
3. «Переход к персонализированной медицине, высокотехнологическому здравоохранению и технологиям здоровьесбережения, в том числе за счет рационального применения лекарственных препаратов, прежде всего антибактериальных» (Председатель академик Макаров А.А.)
4. «Связность территорий РФ за счет создания интеллектуальных транспортных и телекоммуникационных систем, а также занятия и удержания лидерских позиций в создании международных транспортно-логистических систем, освоения и использования космического и воздушного пространства Мирового океана, Арктики и Антарктики» (Председатель академик Погосян М.А.)

**Советы по приоритетам Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации**  
(утверждены Советом при Президенте РФ по науке и образованию 19 декабря 2017 года и приказом министра науки и ВО №733 от 04.10.2018 )

5. «Переход к экономически чистой и ресурсо-сберегающей энергетике, повышение эффективности добычи и глубинной переработки углеводородного сырья, формирования новых источников, способов транспортировки и хранения энергии» (Председатель академик Фортов В.Е.)
6. «Противодействие техногенным, биогенным, социокультурным угрозам, терроризму и идеологическому экстремизму, а также киберугрозам и иным источникам опасности для общества, экономики и государства» (Председатель академик Чехонин В.П.)
7. «Переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта» (Председатель академик Каляев И.А.)

## **Статистические данные по составу Совета**

**«Переход к передовым цифровым, интеллектуальным, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта»**

Члены РАН - 9 человек,  
(в том числе 4 академика и 5 членов корреспондентов)

Представители ведущих научных центров страны - 7 человек

Представители ведущих университетов страны - 7 человек

Представители крупного бизнеса - 5 человек

Представители ФОИВ и государственных корпораций - 5 человек

## **ОСНОВНАЯ ФУНКЦИЯ СОВЕТОВ**

Советы создаются по приоритетам научно-технологического развития РФ в целях выявления, отбора, формирования и мониторинга реализации комплексных научно-технических программ и проектов, внесения предложений по их корректировке или прекращению, экспертного и аналитического обеспечения реализации научно-технологического развития страны, а также формирования предложений по реализации государственной политики в сфере деятельности советов.

ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ПОСТАНОВЛЕНИЕ

от 19 февраля 2019 г. № 162  
МОСКАУ

Об утверждении Правил разработки, утверждения, реализации, корректировки и завершения комплексных научно-технических проектов полного цикла и комплексных научно-технических проектов полного инновационного цикла в целях обеспечения реализации приоритетов научно-технологического развития Российской Федерации

В целях реализации Указа Президента Российской Федерации от 1 декабря 2016 г. № 642 "О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации" Правительство Российской Федерации

1. Утвердить по согласованию с председателем Совета при Президенте Российской Федерации по науке и образованию прилагаемые Правила разработки, утверждения, реализации, корректировки и завершения комплексных научно-технических проектов полного инновационного цикла и комплексных научно-технических проектов полного инновационного цикла в целях обеспечения реализации приоритетов научно-технологического развития Российской Федерации.

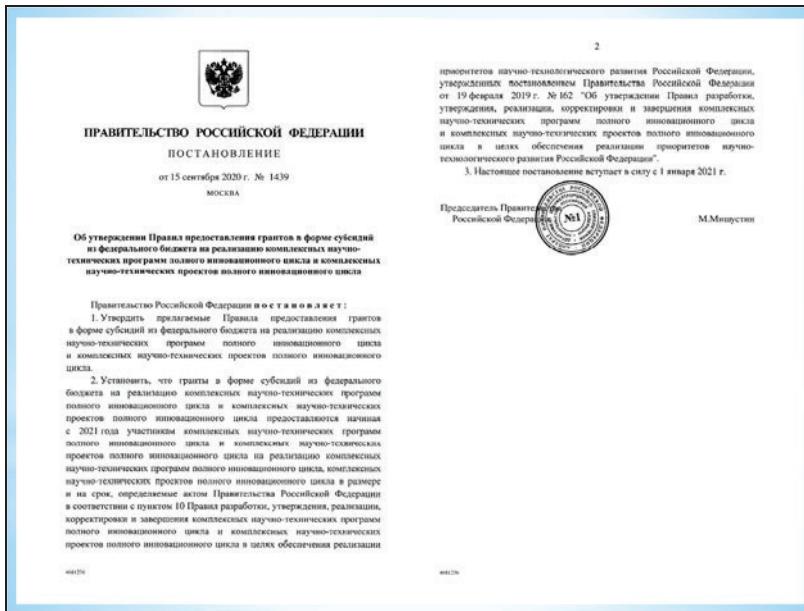
2. Министерству науки и высшего образования Российской Федерации в 2-месячный срок со дня вступления в силу настоящего постановления:  
обеспечить принятие нормативных правовых актов, необходимых для реализации настоящего постановления;

и входящие в их состав научно-технические задачи деятельности советов по приоритетным направлениям научно-технологического развития Российской Федерации.

3. Министерству науки и высшего образования Российской Федерации представлять ежегодно, 1 мая года, следующего за отчетным годом, в Правительство Российской Федерации отчеты о реализации комплексных научно-технических программ полного инновационного цикла и комплексных научно-технических проектов полного инновационного цикла.

Председатель Правительства Российской Федерации

Д.Медведев



## Комплексная научно-техническая программа

**Комплексная научно-техническая программа** - совокупность скоординированных по задачам, срокам и ресурсам комплексных проектов и мероприятий, включающих в себя все этапы инновационного цикла от получения научных и (или) научно-технических результатов до создания технологий, продуктов и услуг, их практического использования и выхода на рынок.

## Цели и задачи КНТП

Комплексные научно-технические программы должны формироваться с учетом целей и основных задач научно-технологического развития Российской Федерации, определенных Стратегией научно-технологического развития Российской Федерации, и быть направлены на:

- формирование условий для развития научной, научно-технической и инновационной деятельности и получения результатов, необходимых для создания технологий, продукции и оказания услуг, обеспечивающих повышение конкурентоспособности высокотехнологичного сектора экономики с негосударственным участием;
- создание групп перспективных и сквозных технологий, обеспечивающих максимальный мультиплектический эффект от их применения и возможность создания принципиально новых продуктов (услуг) для модернизации действующих и формирования новых отраслей (рынков), обеспечивающих реализацию приоритетов научно-технологического развития Российской Федерации, определенных Стратегией;
- содействие в развитии кадрового потенциала сектора исследований и разработок, совершенствовании организационной, инфраструктурной, финансовой, информационной и правовой составляющих;
- получение положительного социально-экономического эффекта, повышение качества жизни общества и уровня национальной безопасности России, развитие ее интеллектуального капитала.

## Регламент формирования КНТП

1. Инициатором КНТП могут выступать заинтересованные органы государственной власти, члены советов по приоритетным направлениям научно-технологического развития Российской Федерации, организация реального сектора экономики, общественные объединения, институты развития, иные организации.

Инициатор КНТП направляет в профильный Совет по приоритетному направлению заявку на разработку КНТП по форме, установленной Министерством науки и высшего образования Российской Федерации.

2. Совет по приоритетному направлению проводит анализ заявки на наличие имеющихся научных заделов и научно-технических результатов, которые могут быть использованы для достижения целей предлагаемой к разработке КНТП, а также перспектив выхода на рынок предлагаемых к разработке технологий, продуктов и услуг и принимает решение о направлении в Координационный совет предложения о разработке КНТП;

3. Координационный совет рассматривает предложение о разработке КНТП, направленное советом по приоритетному направлению, и принимает решение о направлении в Правительство Российской Федерации предложения о разработке КНТП.

4. Правительство Российской Федерации по согласованию с президиумом Совета при Президенте Российской Федерации по науке и образованию принимает решение целесообразности формирования КНТП и определяет ее ответственного исполнителя - координатора (федеральный орган исполнительной власти, осуществляющий функции по выработке государственной политики и нормативно-правовому регулированию в сфере, соответствующей направлениям реализации комплексной программы) который разрабатывает взаимоувязанную по срокам и финансированию КНТП.

5. КНТП утверждается постановлением Правительства Российской Федерации.

## Формирование заявки на КНТП



### Инициирование, разработка и утверждение комплексных научно-технических программ и проектов полного инновационного цикла (КНТП) в соответствии с Постановлением Правительства №162 от 19 февраля 2019 года



КОМПЛЕКСНАЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ ПРОГРАММА  
ИССЛЕДОВАНИЙ, РАЗРАБОТОК, СОЗДАНИЯ ПРОДУКТОВ И УСЛУГ НА ПЕРИОД ДО 2024 ГОДА

## Новые композитные материалы: технологии конструирования и производства

**Ответственный исполнитель-координатор:**  
**ГК «РОСАТОМ»** (Соглашение с Правительством РФ по  
развитию направления «Технологии создания новых  
материалов и веществ» от 19.07.2019)

**Соисполнители:** Минобрнауки, Минпромторг, Минэкономразвития, Минстрой, Минэнерго, Росстандарт

**Ключевые заказчики:** Росатом, Ростех и ОАК, Роскосмос, Газпром нефть, Лукойл, Роснефть, РЖД, ОСК, Русгидро, Россети, Росавтодор..

**Инициаторы:** МГУ им. М.В. Ломоносова и НИЦ Курчатовский институт

ЗАМЕСТИТЕЛЬ ПРЕДСЕДАТЕЛЯ  
ПРАВИТЕЛЬСТВА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
МОСКВА

Госкорпорация "Росатом" (А.Е.Лихачеву) - созыв  
Минобрнауки России (В.Н.Фалькову)  
Минпросвещения России (С.С.Кравцову)  
Минпромторг России (Д.В.Мантурову)  
Минцифры России (М.И.Шадееву)  
Минтранс России (В.Г.Савельеву)  
Министр России (И.Э.Файзуллину)  
Минэкономразвития России (М.Г.Решетникову)  
Минфин России (А.Г.Силуанову)  
Разработайте совместно с МГУ имени М.В.Ломоносова, АО "РОСНАНО",  
НИЦ "Курчатовский институт", заинтересованными федеральными органами  
исполнительской власти, организациями и с учетом замечаний и предложений  
президиума Совета при Президенте Российской Федерации по науке и  
образованию проект комплексной научно-технической программы полного  
инновационного цикла "Новые композиционные материалы: технологии  
конструирования и производства".  
Согласованные предложения по вопросам, требующим решения  
Правительства Российской Федерации, представьте в установленном порядке.  
Срок - до 7 мая 2021 г.

10 декабря 2020 г.

ДЧ-ПВ-16259



4811793

Презентация доклада директора Международного  
научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению,  
д.х.н., профессора Блатова Владислава Анатольевича  
«О прогнозировании новых материалов с использованием топологических методов»



**Зачем нужны топологические методы?**

**CSD >1,000,000 структур**

**ICSD ~210,000 структур**

**PCD ~350,000 структур**

**PDF ~500,000 структур**

**Materials Genome Initiative (2011)**  
<https://www.mgi.gov>

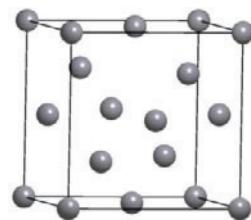
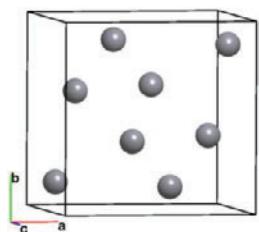
Решение – в разработке

- алгоритмов и программного обеспечения для моделирования материалов;
- систем обмена данными

*Crystallography Reviews*  
Vol. 14, No. 2, April-June 2008, 97–116

The CSD – 450,000 answers ... but what are the questions?  
W. D. Samuel Motherwell<sup>a</sup>  
Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC), 12 Union Road,  
Cambridge, CB2 1EZ, UK  
(Received 3 November 2007; final version received 8 January 2008)

## Зачем нужны топологические методы?

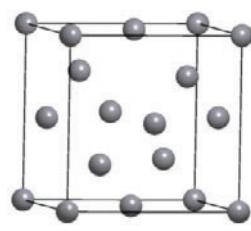
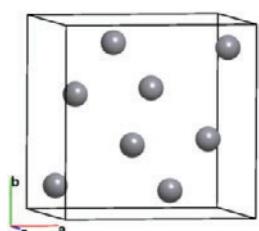


Эксперимент  
или  
моделирование

Это разные  
структуры?

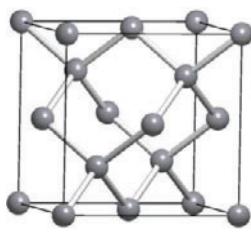
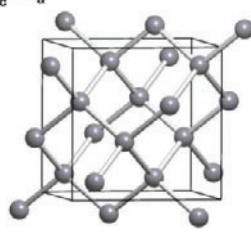
3

## Зачем нужны топологические методы?



Эксперимент  
или  
моделирование

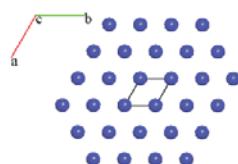
Это разные  
структуры?



Это топология  
алмаза

4

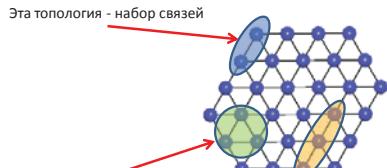
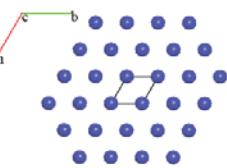
## Что такое топология?



Тривиальная топология

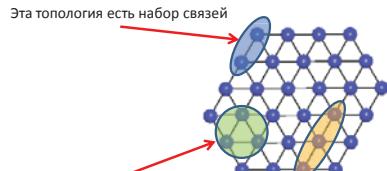
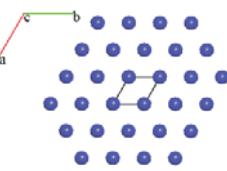
5

## Что такое топология?

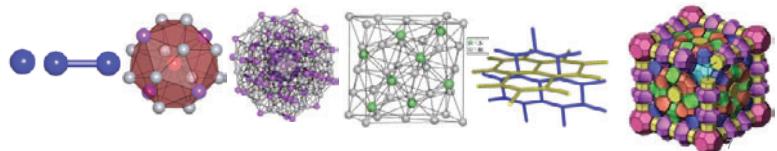


6

## Что такое топология?

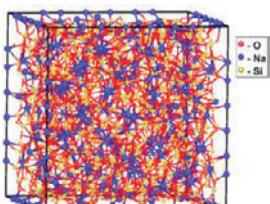


### Топологические объекты



## Топологические представления

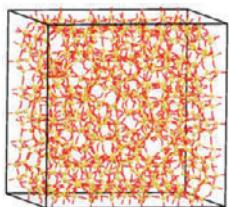
Паулингит, PAU, ICDD Collection Code = 194926



8

## Топологические представления

Паулингит, PAU, ICDD Collection Code = 194926



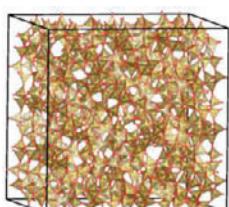
Полное представление (все атомы)

↓  
Каркас SiO<sub>2</sub> (без атомов Na)

9

## Топологические представления

Паулингит, PAU, ICDD Collection Code = 194926



Полное представление (все атомы)

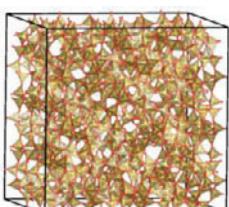
↓  
Каркас SiO<sub>2</sub> (без атомов Na)

↓  
Т каркас (только атомы Si)

10

## Топологические представления

Паулингит, PAU, ICDD Collection Code = 194926



Полное представление (все атомы)

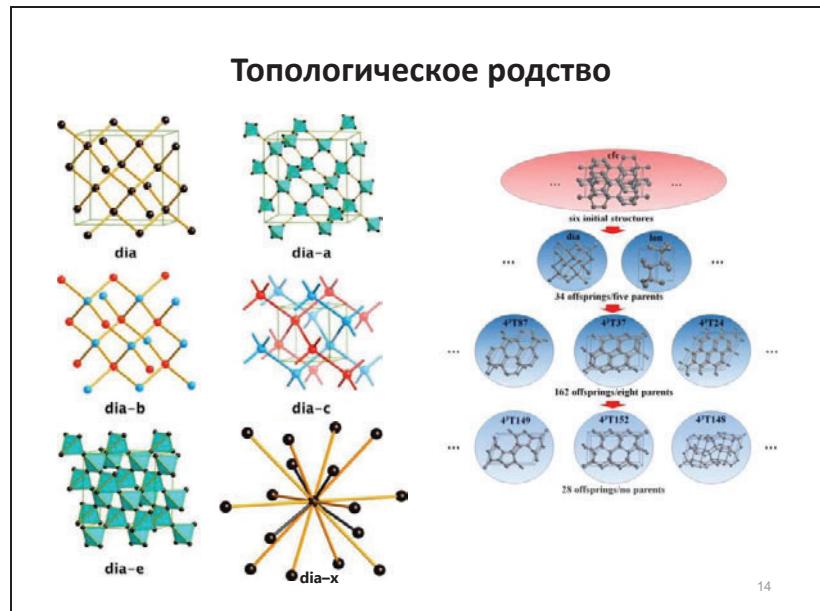
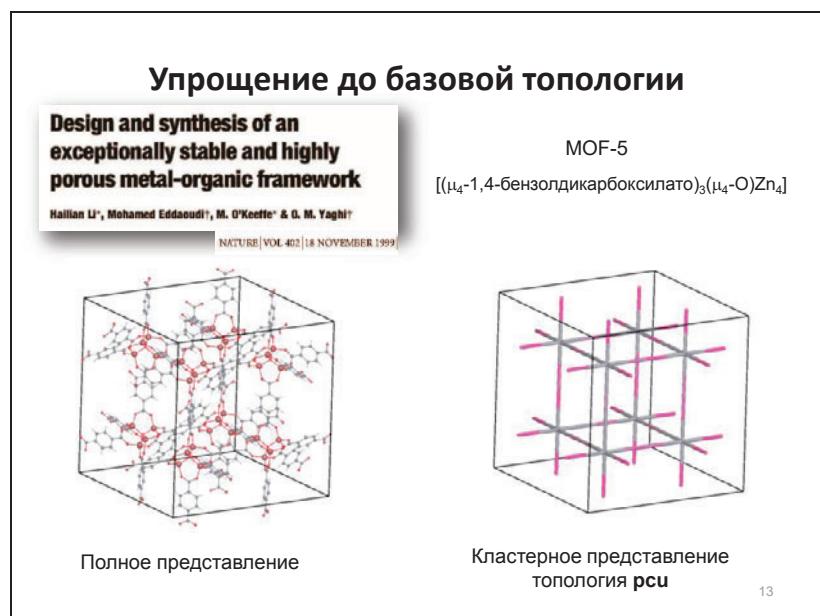
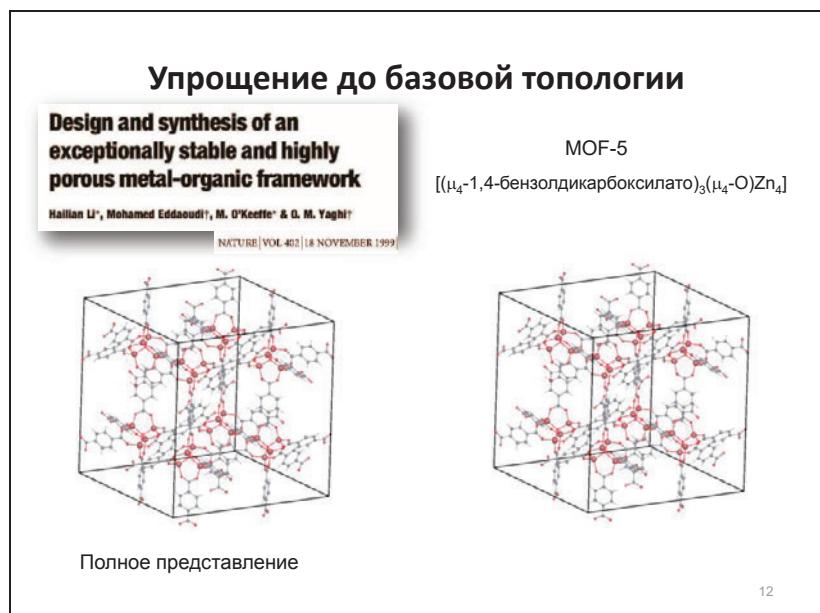
↓  
Каркас SiO<sub>2</sub> (без атомов Na)

↓  
Т каркас (только атомы Si)



Тайлинг (Si полости)

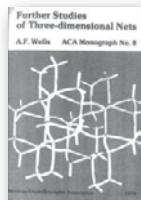
11



## История топологического подхода: теоретическая основа

А.Ф. Уэллс

1954 - 1979

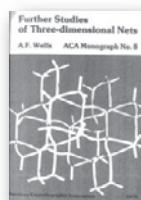


15

## История топологического подхода: теоретическая основа

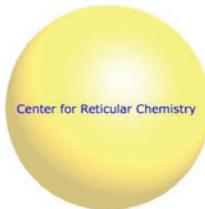
А.Ф. Уэллс

1954 - 1979



М. О'Кифф

1992-...



<http://rcsr.anu.edu.au/>

16

## История топологического подхода: экспериментальные группы

Yaghi Laboratory



Molecular chemistry is concerned with theory of molecular bonding, kinetics, organic chemistry, inorganic chemistry, polymers, proteins... ...in the predetermined structures in which sub-units are repeated and are held together by strong bonds.

CONTACT INFORMATION

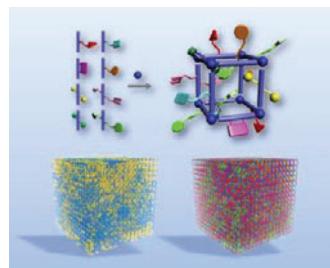
Prof. Omar M. Yaghi  
Jeffrey P. Jacobs Faculty Chair  
University of California, Berkeley  
362 LeConte Hall  
Berkeley, CA 94720-1460  
Ph: 510-643-8007  
yaghi@berkeley.edu

Dr. David J. Gresh  
California Nanosciences Institute  
California Research Institute of BAEF

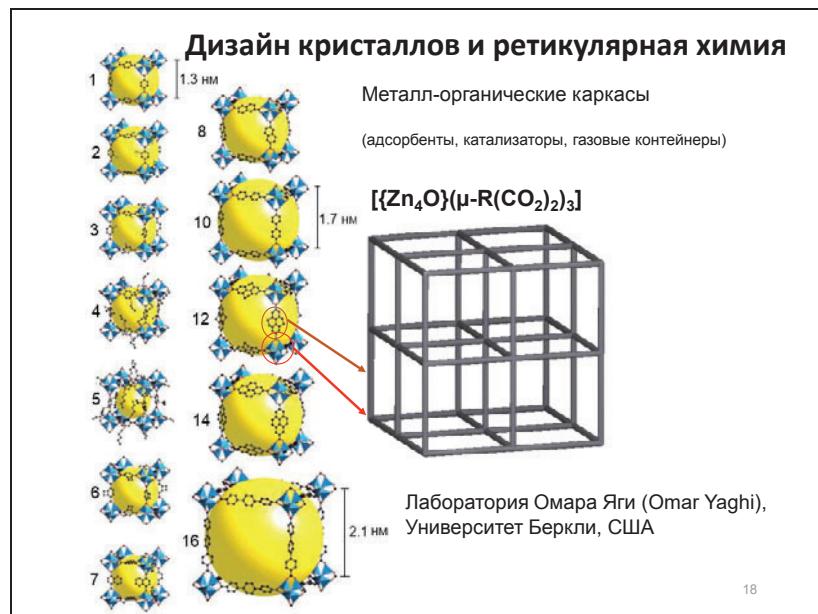
CV (HTML) CV (PDF)

1995-...

Ретикулярная химия



17



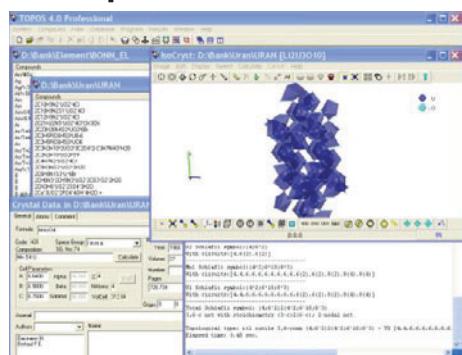
**Что препятствовало распространению  
топологического подхода?**

- Проблема с развитием теории – теория бесконечных периодических графов не разработана до сих пор
- Сложность компьютерного представления – как описать бесконечный кристалл?
- Проблема определения межатомных связей – как научить компьютер мыслить как кристаллохимик?

20

## Современное состояние: Программное обеспечение

ToposPro – с 1989 г.



<https://topospro.com>

21

## Современное состояние: Программное обеспечение

ACTIVE LICENSES: 2104  
COUNTRIES: 91

TOP 5

- 1. China: 457
- 2. Russian Federation: 331
- 3. India: 323
- 4. United States of America: 319
- 5. Germany: 204

Interactive Map

© topospro.com

22

## Современное состояние: Программное обеспечение

<https://topcryst.com>

Find topology Database Sign In

Upload CIF file and get the topological type of your crystal structure.

Drop CIF File with one structure here or Choose file Maximum file size - 2 MB

We use the full and actual version of the TTD collection to determine the topological type.

23

**Современное состояние:  
Программное обеспечение**

<https://topcryst.com>

The screenshot shows two screenshots of the Topcryst website. The left one shows the interface for uploading a CIF file to determine its crystal structure topology. The right one shows the results page with the uploaded file successfully processed, displaying the standard representation of the compound.

24

**Современное состояние: Базы данных**

RCSR  
Reticular Chemistry  
Structure Resource  
**~3000 топологии**

<http://rcsr.anu.edu.au/>

25

**Современное состояние: Базы данных**

RCSR  
Reticular Chemistry  
Structure Resource  
**~3000 топологии**

<http://rcsr.anu.edu.au/>

**TOPOS PRO**

Home Software Databases Consulting FAQ

Menu

Databases

- TTD
- TTB
- TTA
- TTM
- TTB
- TTL
- TTT

Search Databases

Database

The TopoPro Topological Collections are intended for topological analysis and classification both of the whole UX networks and of various types of finite structural units.

With TopoPro Topological Collections you can solve the following tasks of crystal design:

- Determine the type of the overall topology of atomic network. If your network is known you will get its name "name!"
- Determine the topological types of nanoclusters, polymeric complex groups, molecules, ligands, or polyhedral cages. You are wondering if the structure unit you have selected is already known or not? Get the answer immediately!
- Find all examples of crystal structures, where the given topological type was observed. You have synthesis information: polymer, metal-organic framework, or metal cluster and want to know if there are any analogs just right?

**TTD Collection ~200,000 топологии**

**TTO Collection >2,000,000 записей**

26

## Современное состояние: Базы данных

<https://topcryst.com>

The screenshot shows a search interface for crystal databases. At the top, there's a search bar with the text "Search term: dico; 4/7/6". Below it, a red button says "Create ref". There are tabs for "Databases", "Services", and "Help". The main area has sections for "Description" (with a table of database codes, names, properties, and counts), "Database history" (with tables for standard representation and cluster representation), and "Database code" (with a table of codes, names, properties, and counts). The bottom right corner of the screenshot contains the number "27".

27

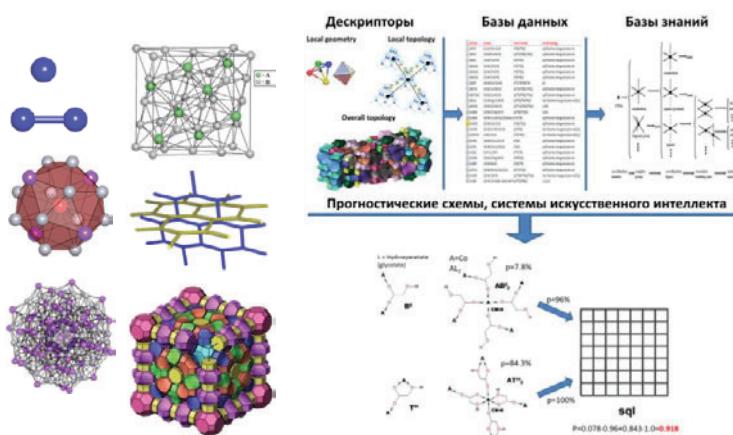
## Современное состояние: Базы данных

<https://topcryst.com>

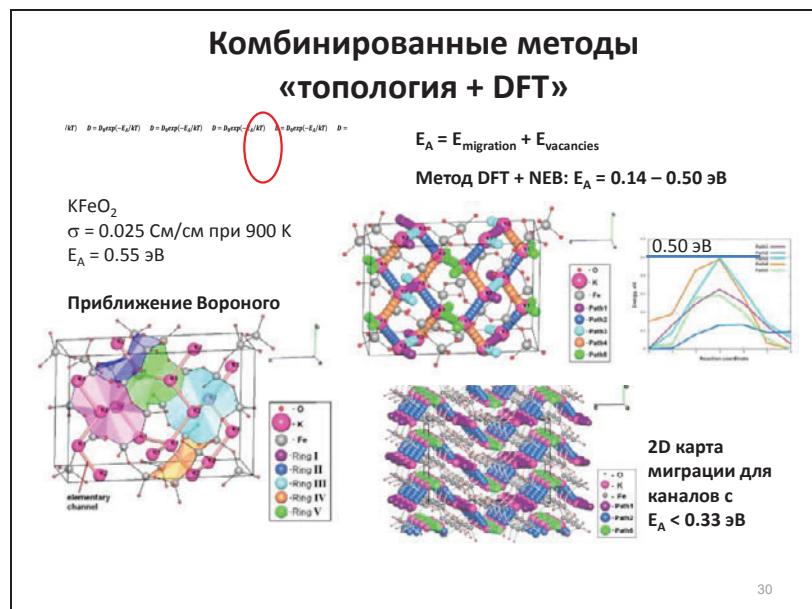
The screenshot shows a detailed view of a crystal structure entry. It includes a header "CSD Entry: MUMYUO", a search bar, and a navigation menu. The main content area displays the crystal structure with atoms labeled A and B, and various analysis tools like "R factor", "Labeling", "Accuracy", and "Mosaic". Below the structure, there's a table of experimental data and a section for "Internal publications". A blue arrow points from the left side of the main search interface towards this detailed entry. The bottom right corner of the screenshot contains the number "20".

20

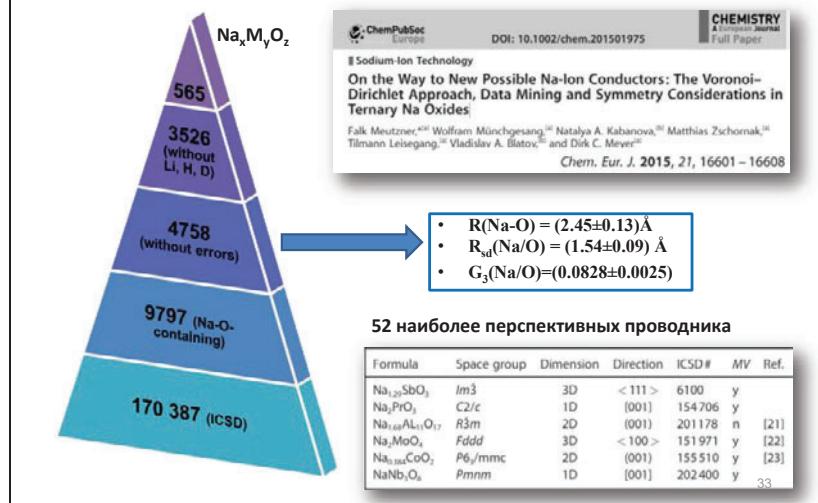
## Базы знаний, искусственный интеллект



29



## Примеры: Скрининг баз данных



## Примеры: Моделирование роста кристаллов

### LETTER

Predicting crystal growth via a unified kinetic three-dimensional partition model

Michael W. Andreyev<sup>a</sup>, James T. Gobbi-Rapetti<sup>b</sup>, Adam R. Hill<sup>b</sup>, Neri Pardi<sup>a</sup>, Martin F. Bertoldi<sup>a</sup>, Fabio Cabiddu<sup>a</sup>, Michael A. Blatov<sup>c</sup>, Davide M. Provenza<sup>c</sup>, Duncan Algire<sup>c</sup>, Björnar Arnest<sup>c</sup> & Julian D. Gale<sup>b</sup>

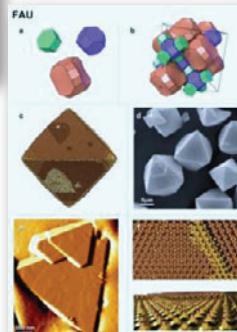


Фотография SEM

Цеолит MFI

Результат моделирования

Фотография AFM

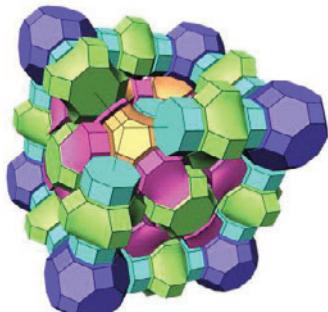


34

## Примеры: Моделирование новых цеолитов

Гипотетический цеолит ISC-1

Предсказан нами: Blatov *et al.*, *Glass Phys. Chem.* 2010



Синтезирован в 2018:

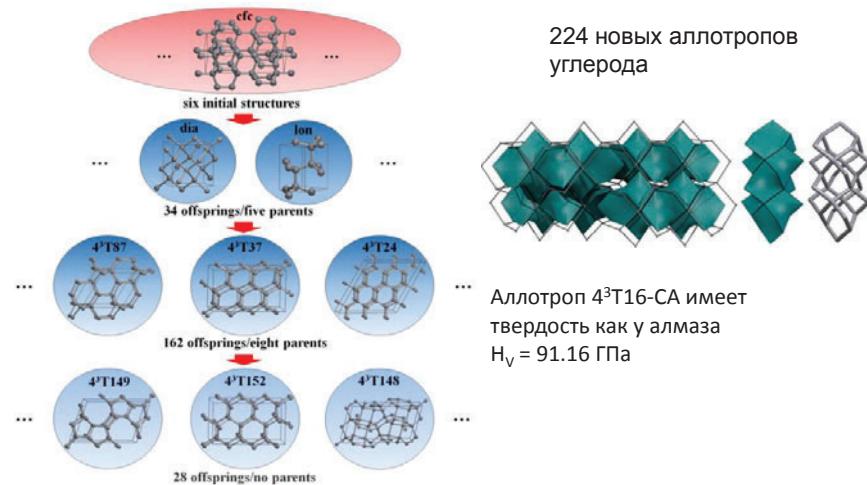
**CM CHEMISTRY OF MATERIALS** DOI: 10.1002/cm.21621

PST-29: A Missing Member of the RHO family of Embedded Isoreticular Zeolites

Hwanjin Lee,<sup>[1,2]</sup> Iku Shin,<sup>[1,2]</sup> Wanuk Choi,<sup>[1]</sup> Hyun-Jae Choi,<sup>[1]</sup> Taejin Yang,<sup>[1]</sup> Xudong Zou,<sup>[1,3]</sup> and Suk-Bong Hong<sup>[1,2]</sup>

35

## Примеры: систематическое генерирование новых структур



36

## Выводы

Геометрико-топологические методы:

- являются основным средством обработки информации по кристаллическим структурам, полученной в результате как эксперимента, так и моделирования
- предоставляют возможности поиска корреляций «состав-структура-свойства», создания баз знаний и систем искусственного интеллекта
- способны существенно ускорить и оптимизировать методы математического моделирования и прогнозирования структуры и свойств материалов

37

Презентация доклада руководителя Суперкомпьютерного центра дизайна перспективных материалов Института физики металлов УрО РАН, д.ф.-м.н., профессора Анисимова Владимира Ильича «Разработка методов компьютерного моделирования материалов с сильными электронными корреляциями»

## Разработка методов компьютерного моделирования материалов с сильными электронными корреляциями

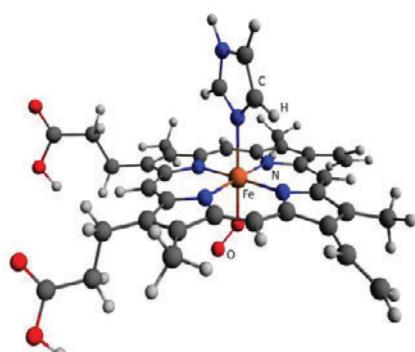


Институт физики металлов  
им. М.Н. Михеева УрО РАН

Анисимов Владимир Ильич

### Что может метод функционала плотности (DFT) ?

- Релаксация структуры
  - Реконструкция поверхности
  - Электронная структура
  - Магнитные свойства
  - Фононные спектры
- и многое другое...

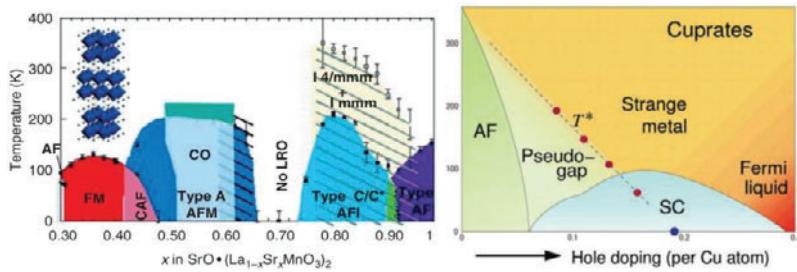


### Примеры применений DFT:

- Материалы для записи DVD
- Моделирование структуры протеинов
- Материалы для наноэлектроники
- Материалы для солнечных батарей и проч.

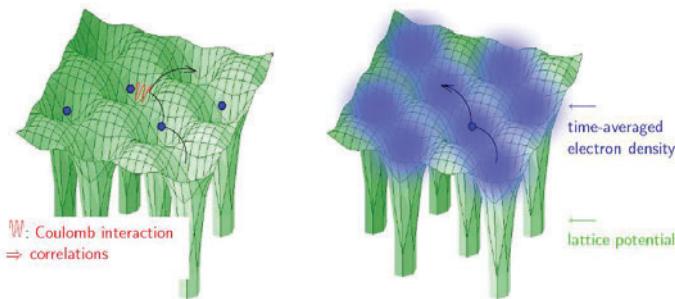
## Что не может DFT?

Манганиты и купраты (Магнитная запись и сверхпроводимость)



Фазовая диаграмма металлического железа и его сплавов (сталей) также не может быть правильно воспроизведена в DFT так как в этом приближении нельзя описать магнитный вклад в энергию в параметрической фазе, который является определяющим для этих материалов

## Электронные корреляции



LDA+U

LDA+DMFT  
методы

DFT

## Методы LDA+U и LDA+DMFT

### Метод LDA+U:

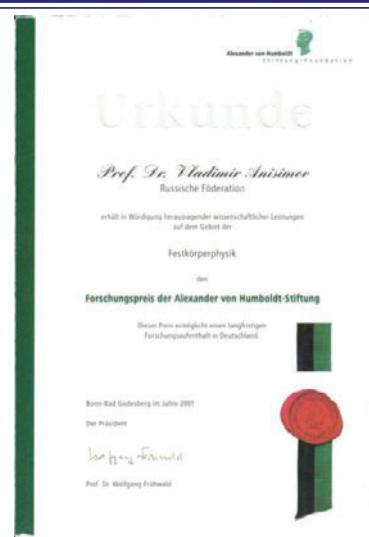
Anisimov, V.I.; Zaanen, J.; Andersen, O.K., PHYSICAL REVIEW B, 44, 943 (1991).  
- 4500 ссылок

### Метод LDA+DMFT:

Anisimov, V.I.; Poteryaev, A.I.; Korotin, M.A.; et al., JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER, 9, 7359 (1997).  
- 500 ссылок

Премия фонда Александра фон Гумбольдта в 2001 г.

Метод LDA+U включен сегодня во все используемые в мире пакеты программ расчета электронной структуры



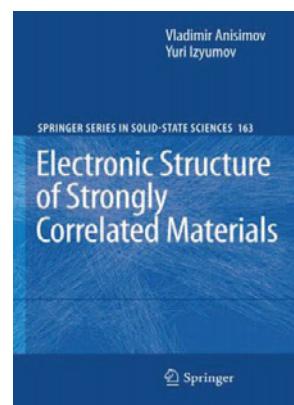
## Применение LDA+U и LDA+DMFT

### Метод LDA+U

- для полупроводниковых и изоляторных соединений **s, p, d и f** элементов с дальним магнитным порядком (оксиды переходных металлов, редкоземельные ионы, и др. соединения с узкими зонами)  
**сильные электронные корреляции**

### Метод LDA+DMFT

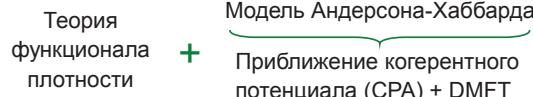
- для соединений **d** и **f** элементов с зонами любой ширины и парамагнитным состоянием при конечных температурах  
**- умеренные и сильные электронные корреляции**



## Развитие методов

- Разработка методов компьютерного моделирования для поисковых исследований новых перспективных материалов
- Дальнейшее развитие методов LDA+U и LDA+DMFT для учета беспорядка по составу и дефектам, спин-орбитальной связи, вычисления параметров магнитных взаимодействий и атомных сил
- Объекты применения: узконные материалы на грани электронного, магнитного, либо структурного перехода
- Для проверки предсказательной силы разработанных методик в дополнение к расчетам электронной структуры выполняется также измерение спектральных свойств

## Применение подхода CPA+DMFT к сплавам



Моделирование свойств сплавов и неупорядоченных систем

- ✓ Магнитная восприимчивость сплавов Fe-Mn и Fe-V
- ✓ Структурный  $\gamma$ - $\epsilon$  переход в сплаве Fe-Mn

*J. Phys.: Condens. Matter 27, 465601 (2015)*

## Пакет AMULET

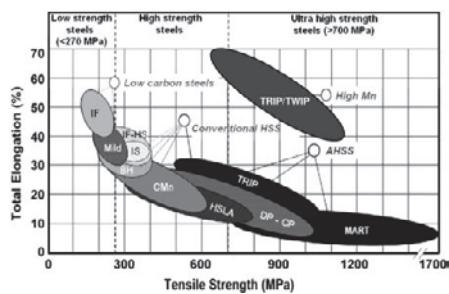


<http://amulet-code.org>

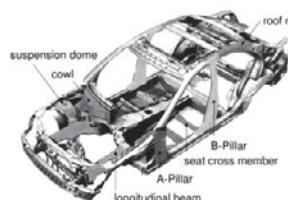
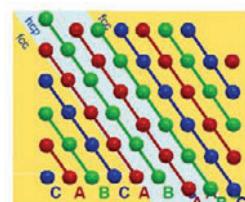
AMULET это пакет программ для вычисления «из первых принципов» сильно коррелированных материалов методом DFT+DMFT. Он основан на объединении метода Функционала электронной плотности (DFT) с Теорией динамического среднего поля (DMFT). Различные магнитные, электронные и структурные свойства материалов могут быть хорошо описаны как в парамагнитной так и в магнитоупорядоченной фазах.

## Структурный $\gamma$ - $\epsilon$ переход в сплаве Fe-Mn

Играет важную роль в TRIP/TWIP стальах

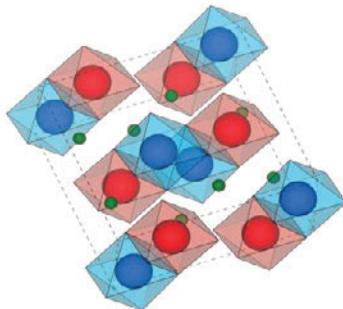


J. Phys.: Condens. Matter 27 (2015) 46560



## Минералы мантии Земли

- Состав нижней мантии:  
ферропериклаз ( $(Fe,Mg)O$ ) и  
перовскит ( $(Fe,Mg)(Si,Al)O_3$   
(вместе до 95% нижней  
мантии).



- Теоретически были исследованы магнитные переходы под давлением в  $FeO$ ,  $(Fe_{1/4}Mg_{3/4})O$  и  $FeSiO_3$ , предложено микроскопическое объяснение магнитного коллапса в данных соединениях.

J. Phys.: Condens. Matter 27, 275501 (2015);  
Phys. Rev. B 93, 245121 (2016)

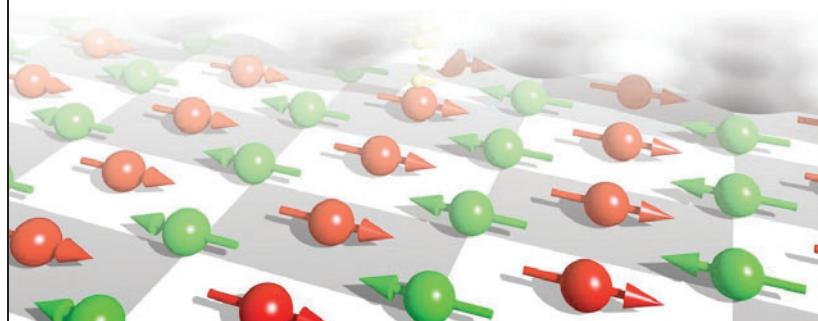
## Низкоразмерные магнитные материалы

### Материалы:

- Димеры ( $\text{MoCl}_4$ ,  $\text{Y}_5(\text{Re},\text{Mo})_2\text{O}_{12}$ );
- Молекулярные магнетики ( $\text{FeP}(\text{Im})$ );
- Двухмерные магнетики ( $\text{Li}_2\text{MnO}_3$ ;  $\text{SrRu}_2\text{O}_6$ );
- Мультиферроики ( $\text{BiFeO}_3$ ,  $\text{CdV}_2\text{O}_4$ ).

### Области применения:

- Датчики магнитного поля;
- Твердотельные запоминающие устройства;
- Спиновые фильтры и другие устройства спинtronики.



## Интерметаллические магнитные материалы

Применяются в:

- постоянных магнитах
  - магнитокалорических материалах
- («зеленые холодильники» - без фреона)



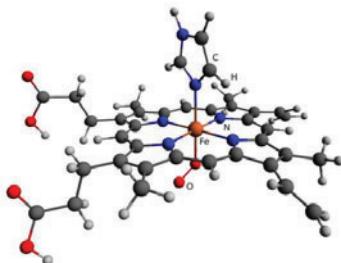
Моделирование спектральных и магнитных свойств новых материалов на основе интерметаллидов R-M (РЗМ и р-, d- элементов) с учетом сильных электронных корреляций и спин-орбитальной связи

*J. Alloys Compd. 640, 56 (2015);  
J. Mater. Sci. 50, 5723 (2015)*

## Электронная структура активного центра молекулы человеческого гемоглобина

HbS – особая форма белка гемоглобина, обладающая пониженной кислород-транспортирующей способностью

Мутационные изменения приводят к изменению электронной структуры активного центра молекулы



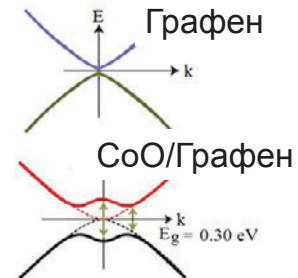
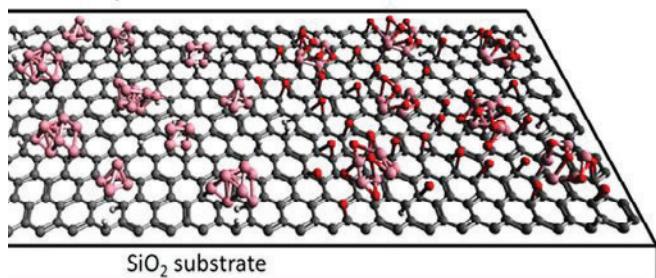
Как подобные изменения электронной структуры могут влиять на функциональные свойства молекулы?

*Russian Journal of Physical Chemistry A, 90, 113 (2016)  
Pis'ma v ZhETF, vol. 103, iss. 10, pp. 741 - 745.*

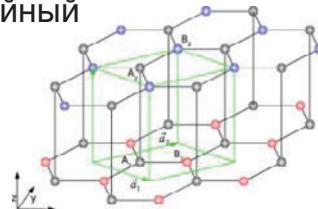
## $\text{CoO}/\text{графен}$ , двухслойный графен

Co

CoO



Двухслойный  
графен



*Carbon 91, 298 (2015);  
Phys. Rev. B 91, 195435 (2015)*

- Изучение электронных и магнитных свойств;
- Моделирование спектров рентгеновского поглощения и комбинационного рассеяния.

## Сверхпроводники



### Классические

Низкие температуры  
Крайне затруднительное  
практическое  
использование

### $\text{Fe}(\text{Pn}, \text{Ch})$ -системы

Промежуточные температуры  
Высокие критические  
токи и поля  
Высокая технологичность  
(металлы)

### Соединения Cu

Высокие температуры  
Промежуточные  
критические токи и поля  
Низкая технологичность  
(керамика)

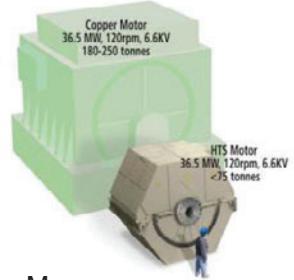
Синтез новых классов сверхпроводников

+

Квантово-механические методы моделирования  
(определение условий критических явлений)

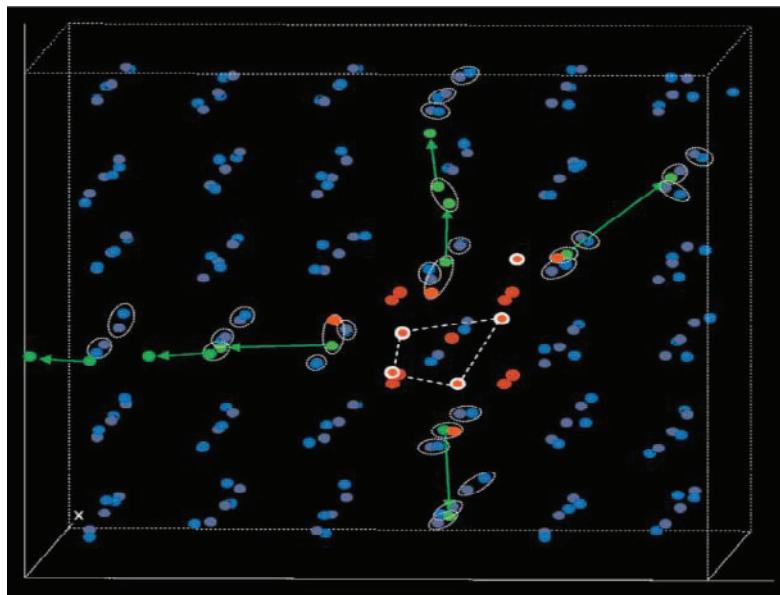
+

Инженерные подходы



Миниатюризация  
Энергоэффективность

## Эволюция атомов Не в Ри (совместно с ВНИИТФ)



*Phys. Rev. B* 77, 224306 (2008)

## Выводы

- Для описания аномальных свойств материалов с сильными электронными корреляциями разработаны методы DFT+U и DFT+DMFT
- Методы реализованы в пакете программ AMULET <http://amulet-code.org> позволяющем описывать структурные, магнитные, электронные и спектральные свойства таких материалов
- Совместно с лабораторией А. Р. Оганова в Сколтехе ведется работа по объединению пакетов AMULET и USPEX

**Презентация доклада первого заместителя генерального директора  
АО «Наука и инновации» ГК «Росатом», д.т.н., профессора Дуба Алексея Владимировича  
«Реализация научно-технической программы развития аддитивных технологий  
Госкорпорации „Росатом“»**



**Комплексное развитие АТ (сегменты)**

Участники:	Партнеры:	Партнеры:	Партнеры:	Участники:
«ФГБОУ ВО МГТУ «СТАНКИН», ООО «Эскизные решения» ФГБУН СФ ФИАН им. П.Н. Лебедева, КНИТУ-КАИ», ООО «НПП «Лазерные системы», НИЦ «Курчатовский институт», Сколтех ФГOU ВО «УГАТУ», ФГБОУ ВО «УдГУ»	ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», ФНЦ Ц «Кристаллография и фотоника»	ФГУП «ВИАМ», Si РусАЛ: ООО «Нормин», ОАО «Композит» Si	ФГУП «РусАТ» Si АО «НПО «ЦНИИПМАШ», ti «Центротех», ИФПМ СО РАН, ИЛИСТ, СПбПУ	ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ», ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, ФГУП «РФЯЦ- ВНИИЭФ» ООО «НПП Лазерные ФГБОУ ВО «МГТУ им. Н.Э. Баумана» Si ОOO НПП «Лазеры и аппаратура ТМ», ОАО «Композит», ФГУП «НПО «Луч», ФГБОУ ВО МГТУ «СТАНКИН».
<b>Участники:</b> ПАО «ОАК», ГК «Роскосмос», АО «ОСК», АО «УЭХК», НИЦ «Курчатовский институт», АО «НИИ «Полюс» им. М.Ф. Стельмаха,	<b>Партнеры:</b> ФГУП «ВИАМ», АО РусАЛ Si АО «УГАТУ», Si ПАО «ОАК», АО «НИИ»	<b>Комплексное развитие аддитивных технологий в РФ</b> АНО - «Центр Компетенций»	<b>Партнеры:</b> ФГБОУ ВО «нНМу» в ФМБА России, ЦИТО	<b>Партнеры/Сопредседатели:</b> АО «НИИ», ФГУП «ВИАМ»
<b>Участники:</b> Центры АТ Si ООО «РусАТ» АО НПО «ЦНИИПМАШ» ФГБОУ ВО «УдГУ» ФГУП «ВИАМ» ОАО «Композит» НИТУ МИСиС ВО «КНИТУ-КАИ», НПО «Техномаш» АО РусАЛ АО ФГБОУ ВО «ПИМУ» ЦИТО АО «Наука и инновации ИЛИСТ СПбПУ МГТУ им. Н.Э Баумана	<b>Участник:</b> ПГМУ им? Сеченова, ГКБ № 1 им. Н. И. Пирогова, ФГБУ «НИИЦТО и/л/ Приорова	<b>Применение АТ в медицине</b>	<b>Партнеры:</b> ФГБОУ ВО «нНМу» в ФМБА России, ЦИТО	<b>Участники:</b> ФАВТ (Росавиация), ОК «РУСАЛ», ПАО «Электромашин», АО «Композит», ФГУП «ВИАМ», ОАО «ИИАТ»
<b>Участники:</b> Центры АТ Si ООО «РусАТ» АО НПО «ЦНИИПМАШ» ФГБОУ ВО «УдГУ» ФГУП «ВИАМ» ОАО «Композит» НИТУ МИСиС ВО «КНИТУ-КАИ», НПО «Техномаш» АО РусАЛ АО ФГБОУ ВО «ПИМУ» ЦИТО АО «Наука и инновации ИЛИСТ СПбПУ МГТУ им. Н.Э Баумана		<b>Приложение АТ в медицине</b>	<b>Партнеры/Сопредседатели:</b> АО «НИИ», ФГУП «ВИАМ»	<b>Национальные стандарты ] и нормативная документация</b>

- Направление «Оборудование»      - Направление «Материалы и технологии»      - Направление «Программное обеспечение»

## Научно-технологическое обеспечение развития АТ



### ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

5 проектов

Офисная програмно-аппаратная платформа (ПАП) управления аддитивным оборудованием с интеллектуальной обратной связью 2020-2024 гг.



3-х осевая оптическая система

2021-2022 гг.

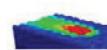
Система контроля и кристаллизации жидкой ванны 2019-2021 гг.



Прикладное программное обеспечение «Виртуальный принтер» 2019-2021 гг.



Система контроля и мониторинга процессов 2019-2021 гг.



### ОБОРУДОВАНИЕ

7 проектов

3D-оборудование по технологиям РАП



Высокотемпературное оборудование СЛПП оборудования СПП 2020-2024 гг.

2021-2024 гг.

АПВ 2020-2024 гг.

АЗВ 2021-2022 гг.

Оборудование для изготовления наливных изделий 2021-2022 гг.

Оборудование для изготовления керамических и композиционных изделий 2021-2023 гг.

3D-принтеры для керамики и полимеров



### ЦЕНТРЫ АТ

7 центров



Центр производства микропроцессоров 2019-2021 гг.

Центры единичных технологий 2021-2024 гг.

2

## Разработка программного обеспечения «Виртуальный принтер» ЕОТП-МТ-097



### Описание проекта

Цель работы - разработать программное обеспечение для моделирования процесса селективного лазерного плавления с целью прогнозирования прочностных характеристик получаемых изделий.

Срок выполнения: 2019-2021 гг.

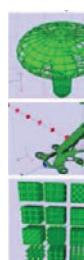
### Задачи работы:

- Разработать расчетноэкспериментальную технологию выбора оптимальных параметров работы оборудования для изготовления материалов и изделий из них с заданным уровнем свойств на основе разработанных расчетных модулей;
- Разработать ПО для топологической оптимизации изделий с целью улучшения массовых характеристик при сохранении эксплуатационных свойств;
- Разработать ПО для подготовки 3D-модели изделия к процессу 3D-печати.

### Основные модули ПО «Виртуальный принтер»

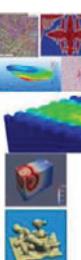
#### Проектирование:

Проектирование 3D-моделей с заполнением объема сетчатой структурой или применением топологической оптимизации



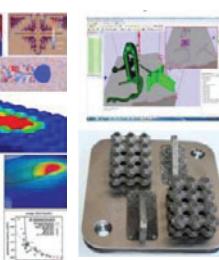
#### Моделирование:

Моделирование на мезо- и макроуровне воздействия лазерного излучения на порошковый слой



#### Производство:

Подготовка файла 3D-печати, подбор на основе расчетов модуля «Моделирование» оптимальных технологических режимов и поддерживающих структур.



3

## Контроль технологических процессов послойного лазерного сплавления ЕОТП-МТ-100



Цель работы - разработать методы непосредственного контроля технологических процессов послойного лазерного сплавления металлических изделий.

### Основные этапы разработки:

2019 2020 2021

#### Разработка

#### Интеграция

#### Интеллектуальный контроль

- Универсальный Комплекс для подключения систем контроля;
- Система контроля равномерности порошкового слоя;
- Макет системы контроля температуры области сплавления, встроенной в оптическую сканирующую систему;
- Макет системы отработки режимов на основе высокоскоростной съемки.



- Работа оптического образца Комплекса подключения систем контроля;
- Система мониторинга геометрии изделия;
- Системы контроля мощности лазерного излучения;
- Макет системы интеллектуального контроля технологических параметров и управления 3D принтером.



Срок выполнения: 2019-2021 гг.

### Задачи работы:

- Анализ условий протекания процесса СЛС и их влияние на формирование дефектов;
- Разработка универсального программного и аппаратного интерфейса взаимодействия систем контроля и стороннего ПО;
- Разработка макета универсального комплекса для подключения систем контроля;
- Разработка макета системы контроля равномерности порошкового слоя;
- Разработка макета системы контроля температуры жидкой ванны;
- Разработка макета системы отработки режима сплавления на основе высокоскоростной камеры.

4

## Разработка трёхосевого лазерного сканатора



Цель работы - разработка устройства на основе опытного образца 3-х осевого лазерного сканатора (Сканатор) для обеспечения одновременной работы постоянного и импульсного лазеров, а также модуля контроля температуры в зоне расплавленной ванны для управляемого воздействия на кристаллизацию ванны расплава.

Срок выполнения: 2021-2022 гг.

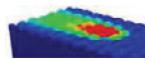
Задачи работы на 2021 год:

1. Разработка концепции Сканатора;
2. Проведение тепломеханических расчетов конструкции макета Сканатора;
3. Разработка конструкций ключевых компонентов Сканатора;
4. Изготовление макета Сканатора;
5. Разработка программы и методики испытаний макета Сканатора (ПМИ);
6. Проведение испытаний макетов узлов Сканатора;
7. Разработка стенд для испытаний Сканатора;
8. Выпуск РКД Сканатора.

### Технология

Устройство сканатора обеспечит возможность подключения дополнительных систем с целью контроля процесса селективного лазерного плавления, таких как:

- 1. Система контроля температуры** в области лазерного плавления металлического порошка



- 2. Система контроля кристаллизации ванны расплава** после воздействия лазерного излучения на металлический порошок



### Оборудование



Внешний вид сканирующей оптической системы (Сканатор)

Габариты зоны сканирования, мм (диаметр):  
не менее 300x300x300 мм с  
обеспечением диаметра пучка -  
не более 80 мкм

### Область применения в оборудовании СЛП



5

## Разработка отечественной программно-аппаратной платформы управления аддитивным оборудованием



Цель работы - разработка программно-аппаратной платформы (ПАП) для аддитивного производства изделий заданного качества путем применения интеллектуальной обратной связи на основе результатов цифрового моделирования физических процессов, а также мониторинга контроля/управления технологических параметров процесса.

Срок выполнения: 2021-2024 гг

Задачи работы на 2021 год:

1. Интеграция в макет ПАП макета программно-аппаратного комплекса (ПАК), включающего в себя системы непосредственного контроля аддитивного процесса;
2. Разработка эскизных проектов (ЭП) для изготовления экспериментальных образцов (ЗО) отечественной модульной ПАП;
3. Испытания интегрированного ПАК в составе ПАП;
4. Демонстрация работоспособности макета ПАК в примере изготовления (3D-печати) фрагмента сложнопрофильного изделия.

### Технология

Программно-аппаратная платформа обеспечит возможность синхронизации следующих компонентов аддитивного оборудования:

- 1. Системы управления основными модулями оборудования**



- 2. Отечественные лазерно-оптические системы**



- 3. Система управления кристаллизацией**



- 4. Программное обеспечение «Виртуальный принтер»**



- 5. Программный аппаратный комплекс систем контроля**



### Оборудование

Опытный образец ПАП будет универсален и обеспечит возможность работы с различными типами аддитивного оборудования:

1. Оборудование по типу селективного лазерного плавления (СЛП) с максимальным оснащением дополнительными системами



2. Оборудование по типу аддитивного электро-лугового выращивания (АЭВ) на основе 5-осевого позиционирования



3. Оборудование по типу аддитивного плазменно-лугового выращивания (АПВ) на основе 3-осевого позиционирования с послойным упрочнением



4. Оборудование по типу высокотемпературного селективного лазерного плавления (ВТСЛП) с контролем температуры



5. Оборудование по типу высокотемпературного селективного электронно-лугового плавления (ВТСЭЛП)



6

## Исследование влияния пучковой энергии в процессе СЛП ЕОТП-МТ-096



Цель работы - качественное повышение характеристик традиционных металлических материалов в результате внешнего воздействия на кинетику фазового перехода при затвердевании расплавов

Срок выполнения: 2019-2021 гг.

Задачи работы:

- Определить основные закономерности роста твердой фазы при кристаллизации расплавов типа Fe-Cr-Ni, Ti-Al-V;
- Провести численное моделирование стимулированного лазерным излучением теплоподъемления и нагрева исходного слоя порошка на основе Fe-Ti;
- Определить механизмы воздействия на кинетику фазового перехода при затвердевании расплавов на основе Fe-Ti;
- Создать экспериментальную установку для управления процессом затвердевания при послойном СЛП металлических порошков на основе Fe-Ti.

### Основные этапы исследований:

2019 2020 2021

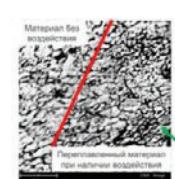
Эксперимент

Макет

Технология

#### Определен метод воздействия:

Ультразвуковое воздействие на зону переплава определяемое спиралевидной составляющей мощности греческого лазерного излучения, приводит к уменьшению размеров зерен исходного металла **более чем в 3 раза**.



#### Лабораторный образец:

Создана лабораторная установка, позволяющая воздействовать на процесс затвердевания при СЛП. Отработаны режимы управления процессом затвердевания.

Интеграция в установку СЛП. Разработанная система управления затвердеванием на базе двухлазерной сканирующей системы будет интегрирована в промышленную установку селективного лазерного плавления.



7

**Разработка аддитивных технологий печати металлических и композиционных изделий на оборудовании с высокотемпературным подогревом рабочего объема**



РОСАТОМ

**Цель работы** - разработка технологии и оборудования для печати изделий из реакционных, тугоплавких и композиционных материалов методом селективного лазерного плавления с высокотемпературным подогревом (ВТСЛП)

Срок выполнения: 2021-2024 гг

**Задачи работы на 2021 год:**

- Уточнение номенклатуры целевых изделий;
- Разработка лабораторной технологии получения изделий методом ВТСЛП с применением сплавов:
  - сплав на базе гамма-алюминида титана (TiAl);
  - сплав Inconel 718;
  - дисперсио-упрочненный композиционный материал на базе жаропрочного никелевого сплава.
- Разработка основных конструктивных решений модуля высокотемпературного подогрева и установки лабораторной установки СЛП;
- Изготовление узлов лабораторной установки СЛП;
- Разработка эскизного проекта модуля высокотемпературного подогрева лабораторной установки ВТСЛП и изготовление узлов лабораторной установки СЛП;
- Изготовление макета модуля высокотемпературного подогрева.

**Целевые изделия**

**Изделия атомной отрасли**

В настоящее время потенциальный исполнитель проводит переговоры с АО «НИКИЭТ» по вопросу выбора целевых изделий для работы в составе АСММ

**Пример целевых изделий**



**Пример целевого изделия для применения в авиации (ОКБ имени А. Лопырева)**

Турбинное колесо (крыльчатка) - применение в составе

авиационных двигателей

**Материал:** Inconel 718

**Габаритные изделия, мм:**

диаметр = 150, высота 60.

**Оборудование**

Разрабатываемое оборудование по типу

ВТСЛП



**Габариты зоны построения, мм:**

диаметр = 300, высота = 350

Макс. t подогрева - 800 град.С

**Технология**



Материал - порошок Источник

энергии - лазерный луч

Атмосфера - защитный газ

8

**Разработка аддитивных технологий печати металлических и композиционных изделий на оборудовании с высокотемпературным подогревом рабочего объема**



**Цель работы** - разработка технологии и оборудования для печати изделий из реакционных, тугоплавких и композиционных материалов методом селективного электронно-лучевого плавления с высокотемпературным подогревом (ВТСЭЛП)

Срок выполнения: 2021-2024 гг.

**Задачи работы на 2021 год:**

- Разработка технологии и получение опытных партий порошков тугоплавких металлов требуемой морфологии для производства изделий методом СЭЛПП.
- Проведение экспериментальных работ по электронно-лучевой плавке порошков (на основе порошков сплавов никобиймолибден и молибден-ниобий).
- Разработка эскизного проекта макета системы нейтрализации заряда порошка (СНП) для установки СЭЛПП. Изготовление и испытание макета СНП.
- Разработка эскизной конструкторской документации на макет системы подачи порошка для установки СЭЛПП.
- Разработка эскизной конструкторской документации (ЭКД) электронно-лучевой пушки (ЭЛП) для установки СЭЛПП и изготовление узлов ЭЛП.

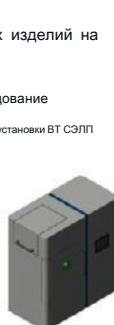
**Целевые изделия**

**Госкорпорация «Росатом»**

Элементы активных зон ЭВУ с прямым и турбомашинным преобразованием энергии

**Оборудование**

Эскиз установки ВТ СЭЛП

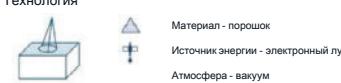


**Габариты зоны построения:**

d=300 mm, h=350 mm.

Макс. t подогрева - 1000 град.С

**Технология**



Материал - порошок

Источник энергии - электронный луч

Атмосфера - вакуум

9

**Разработка технологий и аддитивного оборудования прямого выращивания заготовок элементов внешнедорожного острова и пространственных изделий с применением проволочных материалов**



**Цель работы** - разработка технологии и оборудования прямого выращивания пространственных изделий из титановых сплавов с применением проволочных материалов.

Срок выполнения: 2021-2024 гг.

**Задачи работы на 2021 год:**

- Выбор целевых изделий для отработки технологии производства изделий внешнедорожного острова методом АЭВ.
- Отработка технологии печати образцов методом АПВ, с учетом расширения номенклатуры материалов изделий.
- Разработка опытной технологии производства проволоки из номенклатуры титановых сплавов.
- Исследование зависимости механических свойств металла при АЭВ.
- Исследование и разработка методов отжига изделий.
- Разработка математического программного пакета для выбора стратегии печати отдельных узлов конструкций методом АЭВ согласно результатам экспериментальных исследований.
- Изготовление узлов установки для прямого выращивания заготовок элементов внешнедорожного острова методом АЭВ и АПВ.

**Целевые изделия**

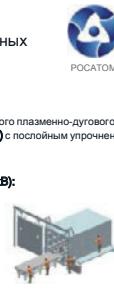
**Сотовая панель** - пространственное изделие, составная часть корпуса авидвигателей (ПАО «Туполев»)

**Материал:** титан ВТ6ч  
**Габариты изделия (ДxШxВ):** 2720\*680\*16,6 мм



**Оборудование**

Установка аддитивного плазменно-дугового выращивания (АПВ) с послойным упрочнением



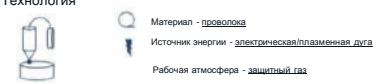
**Габариты зоны построения (ДxШxВ):**  
4000x1000x200 мм



Установка аддитивного электро-дугового выращивания (АЭВ) с 5-осевым позиционированием

**Габариты зоны построения (ДxШxВ):**  
2500x2500x1000 мм

**Технология**



Материал - проволока

Источник энергии - электрическая/плазменная дуга

Рабочая атмосфера - защитный газ

10

## Разработка технологий и оборудования производства керамических и композиционных изделий методами аддитивных технологий.



РОСАТОМ

**Цель работы:** разработка технологий 3D-печати заготовок композиционных соединений под силицирование на основе порошкообразного карбида кремния, различных форм углерода и синтетического связующего для получения сложногеометрических изделий с заданным уровнем свойств

Срок выполнения: 2021-2023 гг

### Задачи работы на 2021 год:

1. Разработка технологии получения заготовок композиционных соединений под силицирование с применением аддитивных технологий.
2. Разработка эскизной конструкторской документации на макеты целевых изделий
3. Разработка программы и методики испытаний макетов целевых изделий
4. Создание реакционно-связанного карбида кремния, полученного с применением 3D-печати
5. Испытания и испытания макетов целевых изделий
6. Разработка эскизной конструкторской документации на комплектующие опытного оборудования
7. Изготовление моделей комплектующих опытного оборудования
8. Создание композиционной основы под силицирование

### Целевые изделия

Применение в агрессивных средах и условиях высокотемпературной эксплуатации (до 1600-1800 °C), например:

- Подшипники;
- Вкладыши критического сечения;
- Торцевые уплотнения;
- Теплообменники.



### Оборудование

Оборудование по типу нанесения пасты (LDM) для аддитивного изготовления изделий из керамических изделий на основе SiC



Эскиз оборудования

**Потенциальные потребители:** АО «ЦКБМ», АО «ОКБМ «Африкантов», АО «КБП», ФГУП «ПО Старт», ОДК.

**Материал:** реакционно-связанный карбид кремния с наполнителями, в том числе углеродными и керамическими волокнами (RBSIC).

Технология позволит регулировать свойства конечного материала за счет контролируемой ориентации армирующих волокон, создавать градиентные структуры с анизотропией свойства

### Технология



Материал - керамика + связующее

11

## Разработка технологий и оборудования для изготовления изделий из полимерных материалов методами аддитивных технологий



### Описание проекта

**Цель работы:** разработка отечественной технологии создания полимерных и полимерных композиционных материалов (далее ПКМ) на основе конструкционных термопластов и гибридных наполнителей для применения их в аддитивном производстве.

Срок выполнения: 2021-2023 гг

### Задачи работы на 2021 год:

1. Выбор целевых изделий и аддитивной технологии изготовления изделий.
2. Разработка эскизной конструкторской документации на опытный образцы 3D-принтера.
3. Разработка полимерных и ПКМ на основе конструкционных полимеров и различных армирующих наполнителей.
4. Разработка и изготовление армированного стеклопластикового жгута для 3D-печати.
5. Изготовление моделей узлов 3D-принтера.
6. Проведение испытаний для подтверждения свойств ПКМ.
7. Проведение испытаний по подтверждению стойкости к внешним воздействующим факторам (ВВФ) ПКМ.
8. Разработка лабораторной технологической документации на образцы ПКМ на основе конструкционных полимеров и гибридных наполнителей.

### Целевые изделия

Рабочее колесо сепаратора (ОКБМ имени И. И. Африканова)



### Оборудование

Оборудование для изготовления изделий по типу FDM



### Габариты зоны построения:

не менее 300x300x300мм. (ДхШхВ)

### Технология



Материал - проволока

Источник энергии - тепловая энергия

12

## «Разработка 3D-оборудования и технологий для печати металлических изделий по технологии селективного электронно-лучевого сплавления с применением отечественных электронных пушек и систем сканирования»



**Цель работы** - разработать оборудование и технологию электронно-лучевого плавления для изготовления изделий атомной энергетики.

Срок выполнения: 2019-2021 гг.

### Задачи работы:

- Разработать и изготовить оборудование для прямой наплавки проволоки с применением электронно-лучевой
- Отработать технологию электронно-лучевого плавления;
- Продемонстрировать преимущества технологии электронно-лучевой наплавки на примере изготовления изделий атомной энергетики.

### Оборудование

Разработано оборудование электроннолучевой наплавки проволоки.



### Целевые изделия

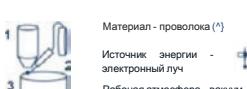


Эскиз установки для электронно-лучевой наплавки проволоки с зоной построения 1500x1200x1400 мм. (ДхШхВ).

Ввод в эксплуатацию - II кв. 2021 года.

### Описание технологии:

Электронная пушка (1) подает энергию в рабочую зону (3) для плавления металлической проволоки (2).



Материал - проволока (^)

Источник энергии - электронный луч

Рабочая атмосфера - вакум

13

## «Разработка комплекса технологий и оборудования для аддитивного производства сложнопрофильных и крупногабаритных изделий атомной энергетики» ЕОТП-МТ-099



Цель работы - разработать оборудование и технологию прямой наплавки крупногабаритных изделий с применением металлических порошков.

**Оборудование**  
Разработано оборудование для прямого лазерного выращивания

**Целевые изделия**  
В качестве целевого изделия выбрано внутренкрупное устройство реактора (выгорада)

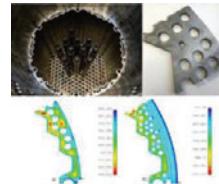
Срок выполнения: 2019-2021 гг

### Задачи работы:

- Выбор изделий для изготовления методом прямой наплавки материала. Выбор материала.
- Разработка концепции оборудования, технических требований и систем контроля параметров (включая защиту зоны построения) и режимов установки.
- Разработка технологии прямого лазерного выращивания. Исследование исходного материала.
- Печать и исследование образцов из стали марки 08Х18Н10Т и 10Х16Н25МТ



зона построения d=2000 мм, h=1000 мм.

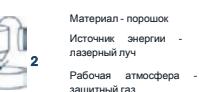


Проведена оптимизация геометрии с целью повышения эффективности охлаждения реактора.

Ввод в эксплуатацию - IV кв. 2021 года.

### Описание технологии:

Материал из питателя (2) сплюснут лазерным лучом и защитным газом подается через сопло (1) в рабочую зону установки (3).



14

## Разработка и материаловедческое обоснование создания материалов и изделий на основе сплавов с памятью формы с управляемой структурой и пьезоэлектрической керамики с применением аддитивных 4Р-технологий



### Описание проекта

**Цель работы:** разработку перспективных материалов на основе сплавов с памятью формы с управляемой структурой и пьезоэлектрической керамики, материаловедческое обоснование их получения и обработки методами 4D-печати.

Срок выполнения: 2021-2024 гг.

### Задачи работы на 2021 год:

- Разработка подходов для прогнозирования механических свойств образца СПФ системы Ti-Ni с градиентными плотностью и химическим составом;
- Изготовление и испытания макета изделия, полученного из порошков сплавов систем Ti-Ni (SLM);
- Изучение и разработка технологических режимов консолидации материалов нового поколения на основе сегнетоэлектрической поликристаллической керамики;
- Изучение и разработка технологических режимов получения СПФ на базе системы Ti-Ni с управляемой структурой и памятью формы образцов (градиентным химическим составом);
- Изучение и разработка технологических режимов «in-situ» синтеза методом 4D-технологии на основе селективного лазерного плавления (SLM) СПФ на базе системы Ti-Ni-HF;
- Разработка экспозиционного проекта на макет изделия с элементом из пьезокерамического материала

### Целевые изделия

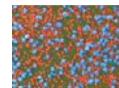
1. Загорная арматура с оптимизированной компоновкой для применения в судостроительной отрасли (АО «Армалит»)



2. Пьезокерамические датчики с повышенными параметрами чувствительности для применения в спиральных антенных и узлах СВЧ техники (АО «НИИ «ЭКРАН»)



3. Прорабатывается кооперация с ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» с целью разработки технологии получения пластинчатых надежий из СПФ на основе Ti-Ni-HF



### Технология In-situ синтез сплава

Технология механического перемешивания порошков Ti и Ni для дальнейшего равномерного распределения химического состава на рабочей платформе СПФ оборудования

15

## Инфраструктура



### Центр производства медицинских имплантатов



**Цель работы:** создание серийного производства медицинских имплантатов для удовлетворения нужд медицины в области производства персонализированных имплантатов челюстно-лицевой хирургии, аугментов и пластин остеосинтеза, а также спинных кейджей.

Срок выполнения: 2018-2021 гг.

### Задачи работы:

- Разработка технологии изготовления имплантатов методом селективного лазерного плавления с применением титановых сплавов;
- Разработка технологии обеспечения для моделирования медицинских имплантатов с учетом снимков МРТ и КТ пациента, с целью обеспечения максимально возможной персонализации геометрии имплантата;
- Разработка методики заполнения сплошных геометрий сетчатыми/блочными структурами с возможностью точной локализации этих структур в объеме имплантата с целью обеспечения оптимальной остеointеграции имплантата с костными и мягмыми тканями пациента;
- Разработка модульных 3D-принтеров с возможностью беспаребойного производства изделий;
- Создание участка серийного производства медицинских имплантатов с возможностью подготовки и стерилизации синтезируемых имплантатов;
- Проведение клинических исследований имплантатов в коoperation с ГМГМУ им. И.М. Сеченова и 1ГКБ им. Пирогова Н.И.

### Центры аддитивных технологий (в разработке)



**Цель работы:** создание информационной системы мониторинга, управления и анализа технологических процессов на базе современных подходов, объединяющей аддитивные производства, а также обеспечивающей качество выпускаемой методом АТ продукции, включая оценку соответствия требуемой НД.

Срок выполнения: 2022-2024 гг.

### Задачи работы:

- Разработать модуль сбора, интеграции и анализа информации данных аддитивного оборудования в центре, входящих в состав единой системы «Промышленного интернета вещей»;
- Обеспечить возможность моделирования, анализа и оптимизации технологического процесса, а также его элементов на базе виртуальной платформы в виде «цифрового двойника»;
- Разработать пользовательские приложения для управления технологическим процессом, в том числе интегрирующие информацию от внешних информационных систем инженерного и управленического характера, в виде виртуализованных ресурсов на базе системы облачных сервисов;
- Разработать модуль автоматического выбора технологии (оборудование, режим и пр.) для изготовления изделия без проведения дополнительных исследований;
- Разработать модуль паспортизации и оценки соответствия изделия всем необходимым нормативным документам отрасли применения.

16

**Презентация доклада заместителя генерального директора ФГУП ВИАМ по металлическим материалам, к.т.н. Бакрадзе Михаила Михайловича «Проблемы развития аддитивных технологий в Российской Федерации»**



**Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года**

Утверждены НТС ВПК 04.03.2021 г.

1

Разработаны в 2011г., рассмотрены на расширенном заседании НТС и одобрены на 3-х межотраслевых совещаниях с участием представителей ФОИВ, ГК, РАН, интегрированных структур, ГНЦ, ведущих КБ, НИУ, предприятий металлургической и химической промышленности общее количество организаций – 80, экспертов – 114.

Актуализация в 2017-2018 годах «Стратегических направлений» с учетом:

- Предложений 13 генеральных конструкторов и 5 руководителей приоритетных технологических направлений
- Стратегии научно-технического развития РФ. Указ президента РФ от 01.12.2016 г. № 648.
- Государственной программы вооружения на 2018-2027 годы
- ГП РФ «Развитие оборонно-промышленного комплекса»

**СОДЕРЖАНИЕ:**

- «Образ будущего» науки о материалах – прогноз развития технологий
- Стратегические направления
- Технологическая «дорожная карта»
- Потребные инфраструктура и ресурсное обеспечение с учетом различных сценариев развития
- Необходимые технологии в других научных дисциплинах и отраслях науки и техники
- Интегральная оценка реализации

**В мировой практике финансируются проекты, в которых используются не менее 30 % материалов нового поколения и технологий**

**«Стратегические направления»:**

1 ✓	✓	✓	Мат.-констру. фундаментально-прикладные исследования, квалификация материалов, герметизацией контракт.
2 ✓			Компьютерные методы моделирования структуры и свойств материалов при их создании и работе в конструкции
3 ✓		✓	Инженерно-технологические, аддитивные материалы и покрытия
4 ✓		✓	Матер. с эффектом памяти формы
5 ✓		✓	Синтетические инновационные, биоматериалы и гибридные материалы
6 ✓		✓	Интервальядные материалы
7 ✓		✓	Легкие, высокопрочные коррозионностойкие свариваемые сплавы и стали, в том числе с высокой вязкостью разрушения
8 ✓			Монодисперсные, жаропрочные суперсплавы, высокотвердые композиты
9 ✓			Энергоэффективные, воспроизводящие и аддитивные технологии получения деталей, полуфабрикатов и конструкций
10 ✓			Магнитные материалы
11 ✓			Металлокерамические и полимерные композиционные материалы
12 ✓		✓	Полимерные композитные материалы
13 ✓		✓	Биомиметрические, керамические, гипсовидные и гибридные материалы
14 ✓		✓	Наноструктурированные, аморфные материалы и покрытия
15 ✓		✓	Сверхлегкие лекоматериалы
16 ✓			Комплексная антикоррозийная защита, упрочнение, износостойкие защитные и теплозащитные покрытия
17 ✓			Климатическая испытательная для обеспечения безопасности и защиты от коррозии, гравий и биологический материалов, конструкций и стальных технических систем в различных средах
18 ✓			

**Основные принципы создания материалов нового поколения**

```

    graph TD
        A[MATERIAL] --> B[KONSTRUKCIJA]
        A --> C[TEKHNOLOGIJA]
        A --> D[SPECIAZILIZOVANOE_OBORUDOVANIE]
        B <--> C
        C <--> D
        D <--> B
    
```

- ПРОВЕДЕНИЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ СОВМЕСТНО С РАН;
- «ЗЕЛЕНЫЕ» ТЕХНОЛОГИИ;
- РЕАЛИЗАЦИЯ ПОЛНОГО ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИТ-ТЕХНОЛОГИЙ;
- ЦИФРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ.

**ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ является организацией, ответственной за реализацию приоритетного технологического направления «Технологии материаловедения»**



**БИНГА**

**Комплексный подход и научные основы создания металлопорошковых композиций и сплавов нового поколения для аддитивных технологий**

5

Компьютерное конструирование	Высокая чистота исходного сплава и узкие интервалы легирования	Высокая чистота и заданный гранулометрический состав МПК	Бездефектная структура синтезированного материала
<p>- оценка фазовой стабильности <math>Md</math>, <math>Si</math>, <math>\Delta E</math>;</p> <p>- фазовый расчет и расчет свойств, а именно состава и количества <math>у</math>- и <math>у'</math>-фаз, периодов решеток фаз, <math>у/у'</math>-мисфита, температур <math>T_{ph}</math>, <math>T_S</math>, <math>T_L</math> и др.</p> <p><b>Литая прутковая (шихтовая) заготовка под распыление</b></p> <p><b>Ta Ru Re W Co Nb Ce La Nd Y Dy Er</b></p> <p><b>Разработка сплавов для синтеза рабочих, сплошных лопаток элементов камер сгорания и др. деталей ГТД непосредственно под технологии СЛС и СЭЛС с учетом особенностей структуры синтезированного материала, с применением легирования редкими металлами и микролегирования РЗМ</b></p>	<p><b>Основные требования к металлопорошковым композициям (МПК)</b></p> <p>Интервалы легирования основных элементов в не превышая 0,2 масс. %</p> <p>Содержание примесей и газов – не более 2-5 ppm</p> <p><b>Микролегирование РЗМ</b></p> <p><b>Гранулометрический состав МПК в заданном интервале 10-63 мкм; Морфология гранул (коэффициент овальности &gt;1)</b></p> <p>Технологические свойства (высокая текучесть и др.)</p> <p>Химический состав, минимальное содержание примесей и газов (не более 5 ppm)</p> <p>Массовая доля кислорода – не более 0,02%</p> <p>Рассея и упаковка в среде инертного газа</p>	<p><b>Исследование механизмов загрязнения оборотных порошков</b></p> <p>Установлено влияние различий режимов экспонирования элементов на загрязнение оборотных порошков кислородом</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Оптимальные параметры синтеза на базе тепловых расчетов;</li> <li>Режимы термической и баротермической обработки;</li> <li>Высокоэффективные методы неразрушающего контроля.</li> </ul> <p><b>Направления теплоотвода и движения фронта кристаллизации</b></p> <p><b>Влияние структурной дефектности на свойства</b></p>

**БИНГА**

**Роль металлургических факторов в производстве МПК**

6

<b>Изменение содержания N в металле при проведении комплексного ВТР расплава в вакууме.</b>	<b>Влияние фильтрации расплава на содержание вредных примесей в ЛПЗ</b>	<b>МПК отличаются большой удельной поверхностью</b>	<b>В процессе синтеза происходит дополнительное загрязнение МПК газовыми примесями</b>	<b>Увеличение содержания газов в синтезированном металле при синтезе в защитной атмосфере</b>
 [N], % mass. 0 5 10 15 15 0,001 0,002 0,003 0,004 0,005 0,006	 Содержание примесей, % до фильтрации после фильтрации O N Si 100% 100% 100% 10% 10% 10%	 МПК отличаются большой удельной поверхностью	 Содержание газов в оборотной и исходной МПК Исходный СЛС (10-40нм) СЛС (50-70нм) СЛС (>70нм) N O 0,01 0,02 0,03 0,04 0,05 0,06 0,07	 Содержание газов в исходной МПК и в синтезированном металле MПК СЛС-металла O N 0,002 0,004 0,006 0,008 0,01 0,012 0,014 0,016
<b>Содержание газов в тонких фракциях МПК на порядок выше, чем в ЛПЗ</b>	<b>Качество МПК закладывается на этапе выплавки шихтовой заготовки. Для получения качественной МПК необходимо применение комплексной технологии рафинирования при вакуумной выплавке</b>			

**БИНГА**

**Принцип разработки материала под задачи аддитивного производства**

7

Общий цикл создания материала для аддитивного производства							
<b>Отработка параметров синтеза (варьируется до 250 режимов)</b>				<b>Контроль геометрии/структурь/чистоты поверхности</b>			
<b>Основной металл</b>	<b>Поддерживающие структуры</b>	<b>Поверхности (контуры)</b>	<b>Компенсация отклонений</b>	<b>Неразрушающий контроль</b>	<b>ГИП</b>	<b>Термическая обработка</b>	<b>Постобработка</b>

**КОНТРОЛЬ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРИАЛА И ОБЩАЯ КВАЛИФИКАЦИЯ (более 1000 образцов)**

<b>Статическая прочность</b>	<b>Циклическая прочность</b>	<b>Теплофизические характеристики</b>	<b>Климатическая стойкость</b>

**Задачи разработки режимов синтеза интерметаллидных сплавов**

8

**Традиционные проблемы несвариваемых сплавов:**

- Кристаллизационные трещины
- Растескивание контуров

**Анализ ключевых факторов процесса СЛС**

**Разработка материала под условия СЛС**

**Прицельная оптимизация параметров СЛС**

**Оптимальная лабиринтная структура**

**Объемная доля пор <0,03%**

**Характеристика**

	$\sigma_y^{20}$ , МПа	$\delta^{20}$ , МПа	$\sigma_b^{1200}$ , МПа
Интерметаллидный суперсплав	890	6,4	150
ВКНА-4УР (литой)*	590-615	1,5-3,0	140-145

\* - поликристаллический аналог по применению

**Ключевые задачи:**

- теплоизолирующие панели камеры сгорания;
- сопловые лопатки турбины

**Формирование слоевой «коркации» из «Ф-фазы» по контуру детали, повышающей жаростойкость**

**Разработан материал на основе интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al и уникальная технология синтеза методом СЛС на оборудовании в стандартной комплектации (без дополнительных систем подогрева платформы построения)**

**Задачи развития аддитивных технологий в области МКМ на основе тугоплавких матриц и разработки технологий электроннолучевой и дуговой наплавки проволокой**

9

**Технологическая цепочка получения МКМ из МКМ на основе Nb и Mo**

**Методы высокопроизводительной печати элементов силового набора авиационной техники.**

Установка Sclaky EBAM (США) (источник энергии плазменный факел) и Norsk Titanium (источник энергии электронный луч)

**Оборудование запрещено к поставке на территорию РФ**

**Технология востребована предприятиями ПАО «ОАК»**

**НЕОБХОДИМА РАЗРАБОТКА:**

- Технологии изготовления сферодизированных металлических композиционных гранул высокотемпературных МКМ на основе тугоплавких матриц;
- Энерго-скоростных процессов и базовых технологических параметров синтеза МКМ на основе тугоплавких матриц методами аддитивного производства;

**НЕОБХОДИМА РАЗРАБОТКА:**

- Российского оборудования для высокопроизводительной дуговой и электроннолучевой наплавки проволокой;
- Отечественного программного обеспечения;
- Технологий выращивания крупногабаритных деталей.

**Задачи развития направления синтез деталей из отечественных термопластичных полимерных порошковых композиций**

10

**Характеристики изготовленных методом СЛС образцов из термопластичной порошковой композиции марки ВТП-9**

Показатели свойств	ВТП-9 (на основе ПА12, Россия)	ВТП-9 (100% вторичка)	PA2200 (EOS GmbH, Германия)
Прочность при растяжении, МПа	44,5 43,6±45,5	44,3 41,9±46,5	≥42
Относительное удлинение при разрыве, %	12 10,6±12,5	16,2 15,3±18,1	≥15
Ударная вязкость по Шарпи без надреза, кДж/м <sup>2</sup>	56 52-63	31 30-33	≥50
Модуль упругости при растяжении, ГПа	1,45 1,4±1,5	1,42 1,42±1,48	1,7±0,1

**Детали из методом СЛС**

**ВТП-9, изготовленные**

**Завихритель**

**Крыльчатка**

**Элемент оснастки для литья**

**Установка СЛС**

**Размер частицы порошковой композиции 20-90 мкм**

**Образцы по ГОСТ 11262-2017 тип 2, изготовленные методом СЛС**

**ОСНОВНЫЕ ПРЕИМУЩЕСТВА МАТЕРИАЛА:**

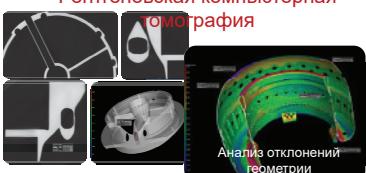
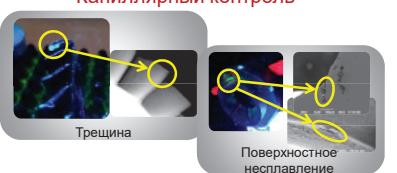
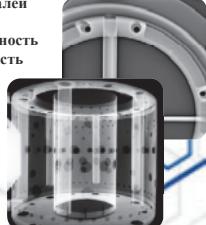
- Изготавливается из отечественного сырья;
- Возможность переработки (спекания) по стандартным режимам для PA2200 на установке;
- Характеристики материала обеспечивают необходимый уровень прочности изделий;
- Возможность вторичной переработки.

**> Материал марки ВТП-9 рекомендован для изготовления слабонагруженных элементов летательных аппаратов (элементов СКВ, кронштейнов и др.)**

**> Для изготовления элементов конструкций с повышенными прочностными характеристиками требуется разработка аддитивных материалов на основе полизифирэфиркетона, полисульфона и т.п.**

**Неразрушающий контроль деталей и изделий аддитивного производства**

11

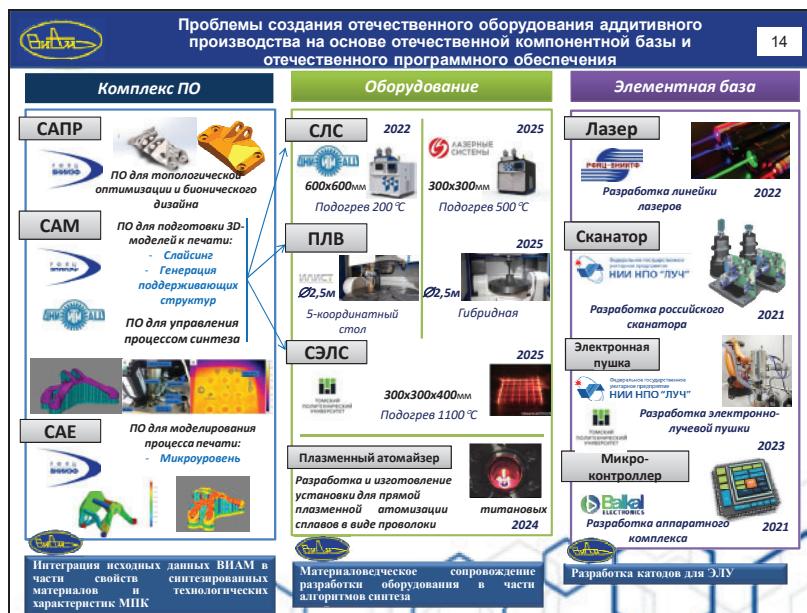
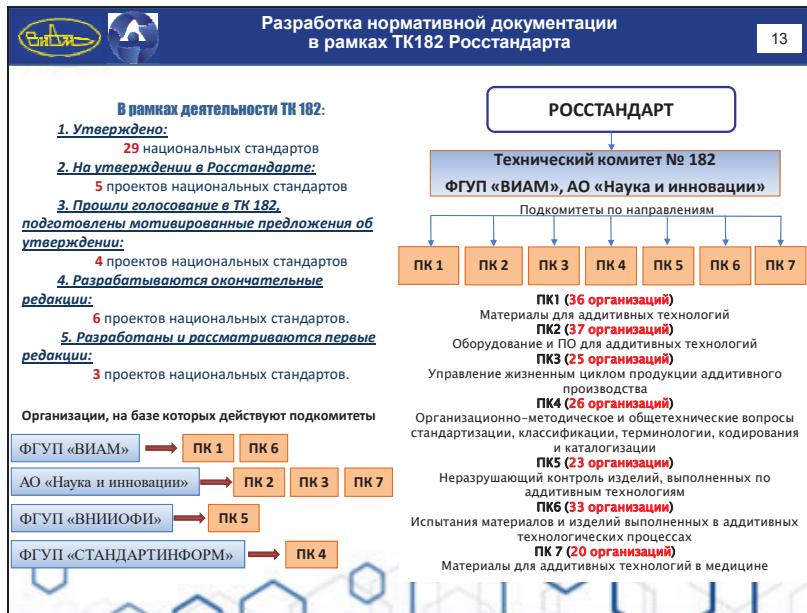
<p><b>Рентгеновская компьютерная томография</b></p>  <p>Анализ отклонений геометрии</p> <p><b>Разработана:</b> Инструкция по проведению РКТ отливок лопаток</p>  <p>Анализ пористости</p> <p><b>НЕОБХОДИМА разработка методик и технологической документации на НК:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>➤ набор статистических данных о критических типах и размерах дефектов, в соответствии с напряженным состоянием и свойствами материала;</li> <li>➤ создание утвержденного перечня методов и адаптированных для деталей аддитивного производства методик и процедур НК.</li> </ul>	<p><b>Капиллярный контроль</b></p>  <p>Трещина Поверхностное несплавление</p> <p><b>Капиллярный метод позволяет выявлять поверхностные дефекты: поры, трещины, несплавления с шириной раскрытия от 1 мкм.</b></p> <p><b>Цифровая рентгенография</b></p> <p>Высокоточный контроль деталей и изделий АТ:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• повышенная чувствительность</li> <li>• высокая производительность</li> </ul> 
---	---

**Разработка основных документов для внедрения технологий в серийное производство**

12

<p>Впервые разработан и согласован документ для классификации дефектов СЛС-заготовок в серийном производстве</p>  <p><b>РТМ 085.104</b></p> <p><b>КЛАССИФИКАТОР ДЕФЕКТОВ</b> Заготовки деталей ГД, изготовленные методом СЛС</p>  <p>Введена классификация дефектов заготовок СЛС:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Поверхностных;</li> <li>-Основного металла;</li> <li>-Прочих.</li> </ul>	<p>Разработан основной документ, регламентирующий требования к заготовкам СЛС в серийном производстве</p>  <p><b>ТУ 08.289</b></p> <p><b>ТЕХНИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ</b> Заготовки фасонные, полученные методом СЛС</p>  <p>Регламентированы требования:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- к химическому составу МПК;</li> <li>- к химическому составу синтезированного металла;</li> <li>- минимальному уровню свойств.</li> </ul>	<p>Разработан и реализован регламент общей квалификации (паспортизации) синтезированных материалов</p>  <p><b>Разработка технологии синтеза</b></p>  <p>Общая квалификация синтезированного материала с определением:</p> <table border="1"> <tr> <td>Статистический параметры</td> <td>Химические свойства</td> <td>Тепловые свойства</td> <td>Компактность</td> </tr> </table> <p>Паспортизованы материалы:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Ni-основа: ЭЛ648-ПС, ВЖ159-ПС, ВЖ171-ПС, ВЛК1-ПС;</li> <li>- Fe-основа: ВНЛ-14</li> </ul> <p>Позволяет провести оценку оборудования СЛС и его ПО, механических свойств синтезированных образцов, качества поверхности и тонкостенных элементов</p>	Статистический параметры	Химические свойства	Тепловые свойства	Компактность	<p><b>РТМ</b></p> <p><b>ОЦЕНКА</b> Конструкции, ПО, механических свойств</p> 
Статистический параметры	Химические свойства	Тепловые свойства	Компактность				

Важнейшим для скорейшего внедрения аддитивных технологий в серийное производство является разработка нормативной документации. И это не только ГОСТы. В соответствии с авиационными правилами АП33, к применению в составе авиационной техники допускаются материалы, прошедшие общую квалификацию, имеющие нормативную документацию на производство (технологическую инструкцию) и поставку (технические условия). ВИАМ совместно с АО «ОДК-Авиадвигатель» впервые в российской промышленности разработаны технические условия на фасонные заготовки, полученные методом СЛС. Разработан Классификатор дефектов заготовок деталей, полученных методом СЛС – руководящий технический материал, описывающий типы и виды поверхностных и внутренних дефектов, а также вероятные причины их возникновения. Для обеспечения возможности трансфера технологий между установками одной марки и разных поколений разработан регламент адаптации технологии, верификации механических свойств, завершающейся выпуском дополнительных сведений в паспорт на синтезированный материал. Благодаря разработанному регламенту можно осуществлять авторский надзор при передаче технологии на оборудование, имеющее конструктивные или программные отличия от оборудования, на котором разработана технология синтеза.



**Развитие аддитивных технологий в Российской Федерации на примере создания двигателя большой тяги ПД-35**

Составлено в 2014 г.

16

Двигатель ПД-14 прошел летные испытания с камерой сгорания в составе которой применена первая аддитивная деталь «Завихритель». Поставлено 18 комплектов деталей

ПД-14

Аддитивные технологии – основа шестого технологического уклада

Лопатки КВД Ti-сплав  
Дефлекторы КС Со-сплав  
Корпус горелки ВЖ159  
Завихритель тангенциальный ВЖ159  
Солло ВЖ159

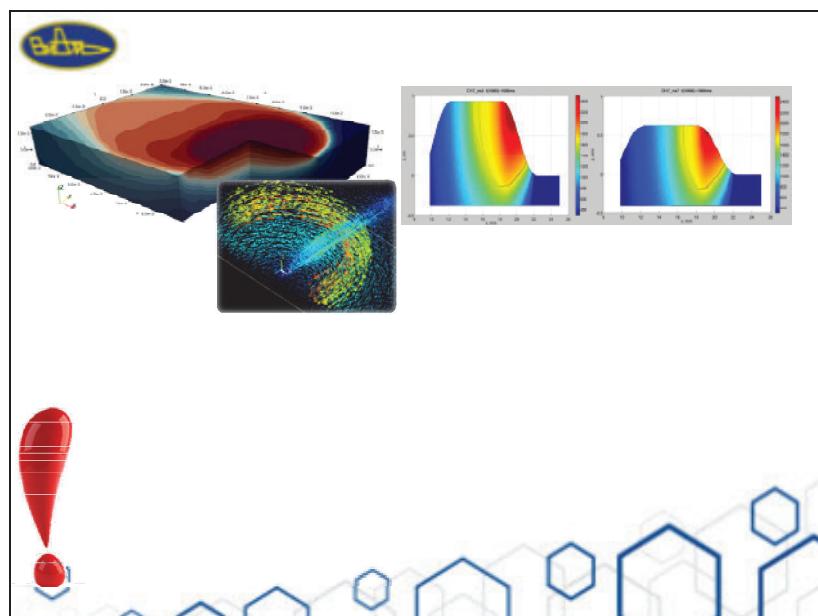
Лопатка ТНД γ-TiAl  
Рабочая лопатка ТВД Со-сплав  
Сектор ВИН6  
Сопловая лопатка ВИН6

ТРДД 5 поколения ПД-35

➢ Класс тяги 24-38 тонн  
➢ Удельный расход топлива 0,49 кг/кгс\*ч

Для реализации аддитивных технологий необходимо создание производственного комплекса газотермической обработки крупногабаритных деталей (лопаток ТНД, корпусов и опор)

Уменьшение времени проектирования в 10-12 раз  
Снижение массы турбины на 10-15%  
Повышение производительности в 10-30 раз  
Уменьшение времени подготовки производства в 6-10 раз





## Проблемы развития аддитивных технологий в Российской Федерации

19

**В условиях санкционного давления зарубежных стран для развития аддитивных технологий в Российской Федерации необходимо обеспечить :**

- Координацию деятельности научных организаций, производственных предприятий по внедрению цифровых и аддитивных технологий нового поколения, включая трансфер технологий и научно-техническое сопровождение, в том числе в рамках реализации крупных инновационных проектов полного цикла, направленных на создание технологических решений, обеспечивающих полный «жизненный» цикл – от получения исходного сырья до конечных продуктов (инновационных изделий) в различных отраслях промышленности, с учетом задач государственных корпораций, интегрированных структур и критических технологий развития науки, техники и технологий РФ
- Создание отечественного программного обеспечения для управления процессами аддитивного производства, топологической оптимизации, подготовки электронных моделей к печати, управления жизненным циклом продукции аддитивного производства;
- Разработку и серийное производство отечественного оборудования (на российской компонентной базе, включая лазеры, сканаторы, микроконтроллеры, электронно-лучевые пушки) для технологий селективного лазерного сплавления, селективного электронно-лучевого сплавления и прямого лазерного выращивания;
- Разработку методик и технологий неразрушающего контроля изделий аддитивного производства;
- Создание системы подготовки кадров высшей квалификации с компетенциями в области аддитивных технологий.



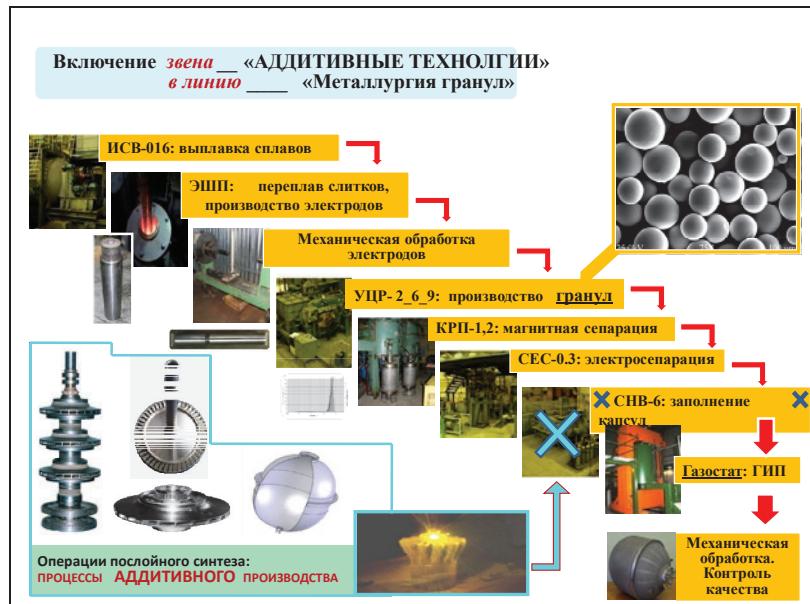
## Предложения в проект протокольного решения

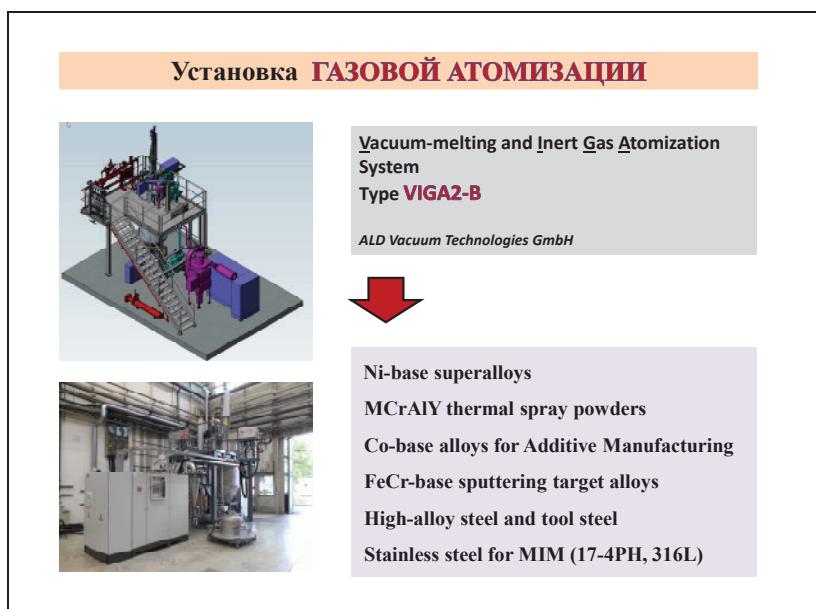
20

1. Учитывая, что внедрение аддитивных технологий, обуславливающих переход промышленности к новому технологическому укладу в интересах создания перспективных образцов сложных технических систем, конкурентоспособных на мировом рынке, имеет государственное значение для обеспечения технологической независимости и национальной безопасности Российской Федерации и требует межведомственной и межотраслевой координации НИР и ОКР **поддержать необходимость реализации с 2021 года первоочередных работ** Комплексного плана по развитию и внедрению аддитивных технологий в Российской Федерации до 2025 года **в рамках НИОКР шифр «Комплекс»** (решение о необходимости реализации рассмотрено 28.01.21 года на совещании под председательством Министра промышленности и торговли Российской Федерации Д.В. Мантурова, протокол № 17-МД/06).
2. Для системного развития в Российской Федерации аддитивных технологий считать целесообразным создание центра «Материалы и цифровые технологии их производства».
3. Отметить необходимость отдельного НИОКР по разработке отечественного оборудования (на российской компонентной базе, включая лазеры, сканаторы, микроконтроллеры, электронно-лучевые пушки) для технологий селективного лазерного сплавления, селективного электронно-лучевого сплавления и прямого лазерного выращивания и разработке отечественного программного обеспечения для управления процессами аддитивного производства, топологической оптимизации, подготовки электронных моделей к печати, управления жизненным циклом продукции аддитивного производства.
4. Отметить необходимость **создания системы подготовки специалистов высшей квалификации** с компетенциями в области аддитивных технологий.

Презентация доклада директора АО «Композит»,  
д.т.н., профессора Береснева Александра Германовича  
«Аддитивные технологии: отечественный и зарубежный опыт,  
состояние и перспективы промышленного освоения в ракетно-космической  
промышленности, ключевые направления исследований и развития технологий»







**BT6 (Grade 5)**

**ГАЗОВЫЕ ВКЛЮЧЕНИЯ**

**Центробежное распыление** ↔ **Газовое распыление**  
[Crucible, США]

**АО «КОМПОЗИТ»: МАРКИ ИЗГОТОВЛIVАЕМЫХ ПОРОШКОВ**

**Титановые сплавы:**  
КТ-1 BT1-0 BT1-00 BT14 BT18Y BT6 **BT6C**  
BT20 BT20-2св BT25Y OT4 ПТ-3В

**Сплавы на никелевой основе:**  
АЖК ЭП741нп НГК6 ЧС57  
In718 In728 In738 In625

**Порошок центробежного распыления (40–125 мкм) одобрен к применению «ARCAM AB» 15.08.2015**

**Технические условия:**  
ТУ 1798-387-56897835-2005 «Гранулы из титановых сплавов»  
ТУ 1479-689-56897835-2016 «Порошок из титанового сплава марки BT20-2св»  
ТУ 1479-690-56897835-2016 «Порошки из титановых сплавов»  
ТУ 1479-691-56897835-2016 «Порошки из никелевых сплавов»

**BT6**  
**BT14**  
**BT5-1кт**  
**АЖК**  
**ЭП741нп**

**ЗАКЛЮЧЕНИЯ ФГБУ ВНИИПО МЧС РОССИИ:**  
- не распространяют пламя  
- не склонны к тепловому самовозгоранию  
- не могут быть отнесены к опасным грузам  
(ГОСТ 19433-88)

**Оборудование АДДИТИВНЫХ процессов**

**Arcam AB**

**EOS 400**

**Дополнительное оборудование**

**Технические характеристики созданной\* установки СЛС-1**  
\*- литера О<sub>1</sub>

Габариты зоны построения	450×450×600 мм
Максимальная масса изготавливаемых деталей	1100 кг
Используемые материалы	Никелевые, титановые сплавы
Рабочая среда	Аргон – Вакуум
Подогрев платформы построения	400 С
Тип, номинальная мощность источника	Иттербийевый волоконный лазер, 400 – 1000 Вт

OAO «Композит» — НПО «Техномаш» — ПАО «Электромеханика» — НТО «ИРЭ – Полюс»

**Системы:**  
газовая  
вакуумная  
нанесения порошка

**Сложнопрофильные детали ДУ**

**3D – ПРИНТЕРЫ для КРУПНОГАБАРИТНОЙ ПЕЧАТИ**

**Отсеки РКТ**  
—  
**ДИАМЕТР до 4 МЕТРОВ**

**РОСКОСМОС**

**Сопловой насадок**  
**Камера сгорания**  
**Форсуночная головка**



## МАТЕРИАЛ ПОСЛЕ 3D - ПЕЧАТИ

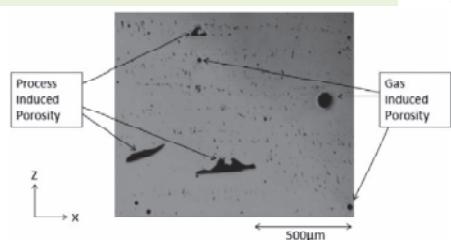
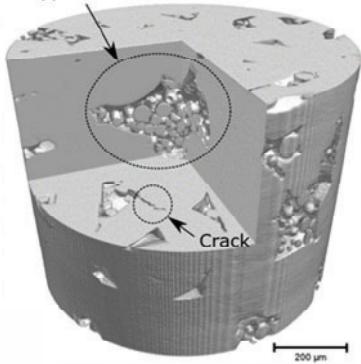
### • Внутренние дефекты

- Пористость в зонах несплавления порошка
- Поверхностная пористость
- Окиси
- Микротрещины



- Негативное влияние на
- Усталостную прочность
- Пластичность
- Вязкость

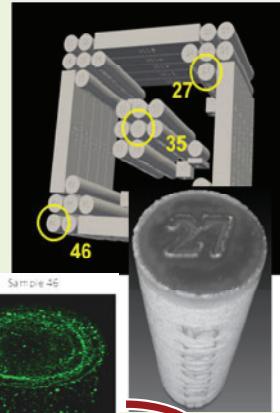
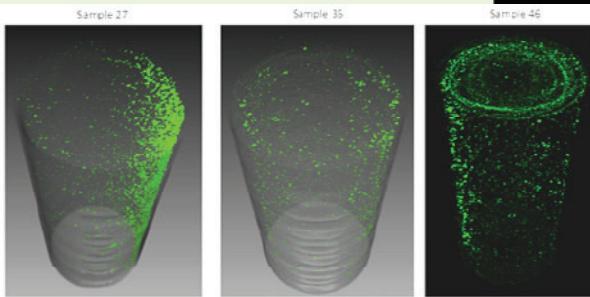
### Trapped Powders



## НЕРАВНОМЕРНОСТЬ ХАРАКТЕРИСТИК 3D - ПЕЧАТИ

**Пример -**  
электронно-лучевая плавка EBM, титан T64:

*различие пористости  
в зависимости от положения образцов  
на пластине построения*



### Транспорты типа «Либерти»



Всего построено \_\_\_\_\_ 2710 судов:

первые 14 \_\_\_\_\_ 230 дней

1941—1942 годы:

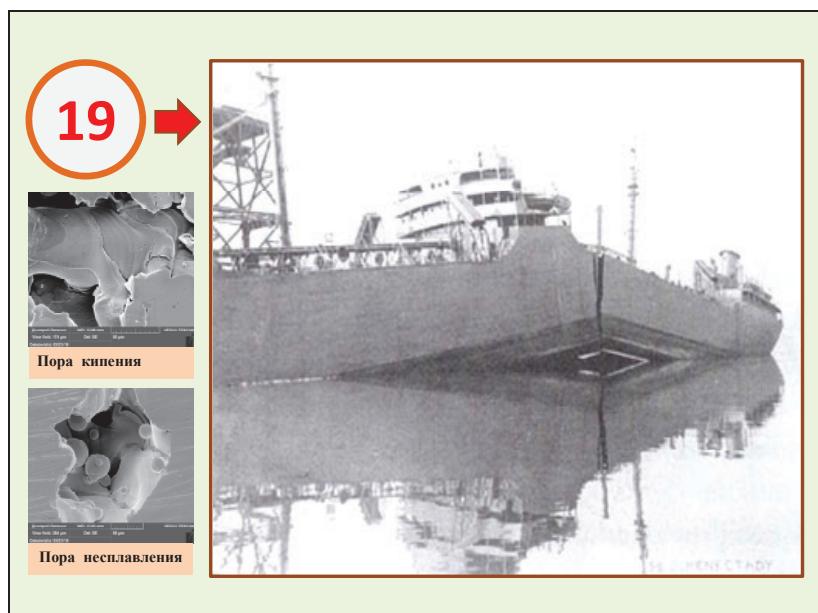
срок постройки уменьшен до \_\_\_\_\_ 42 суток

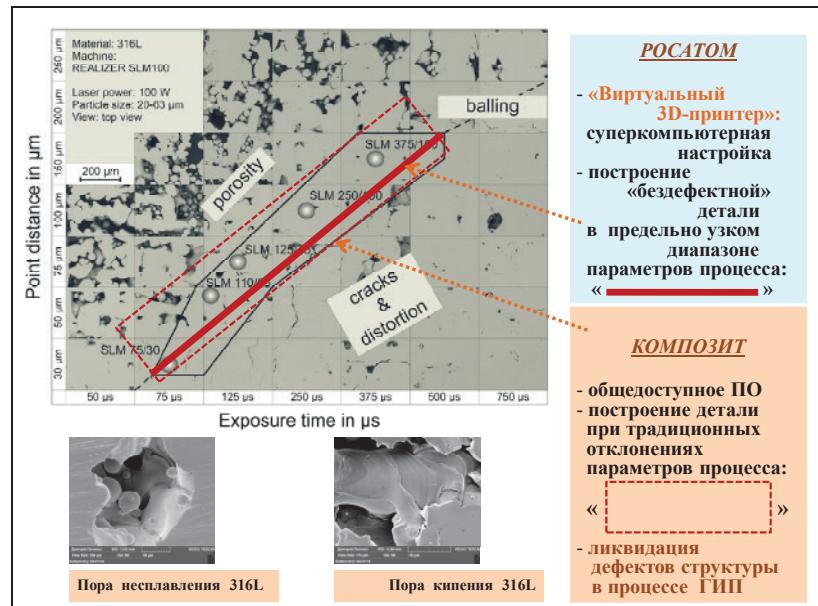
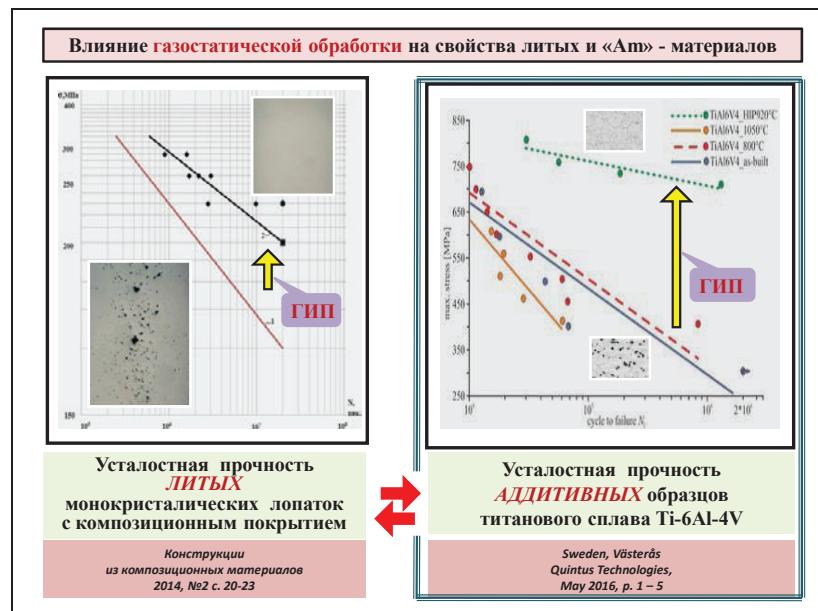
1942 год, ноябрь:

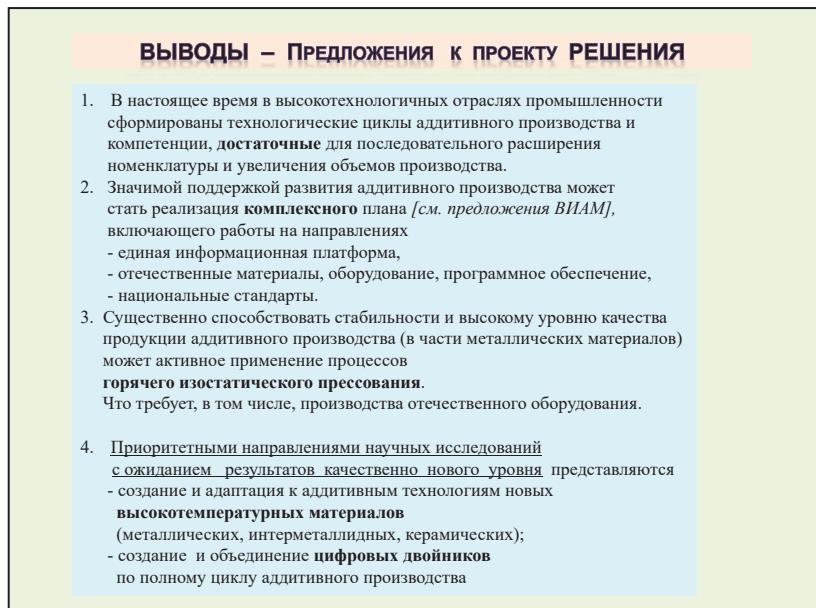
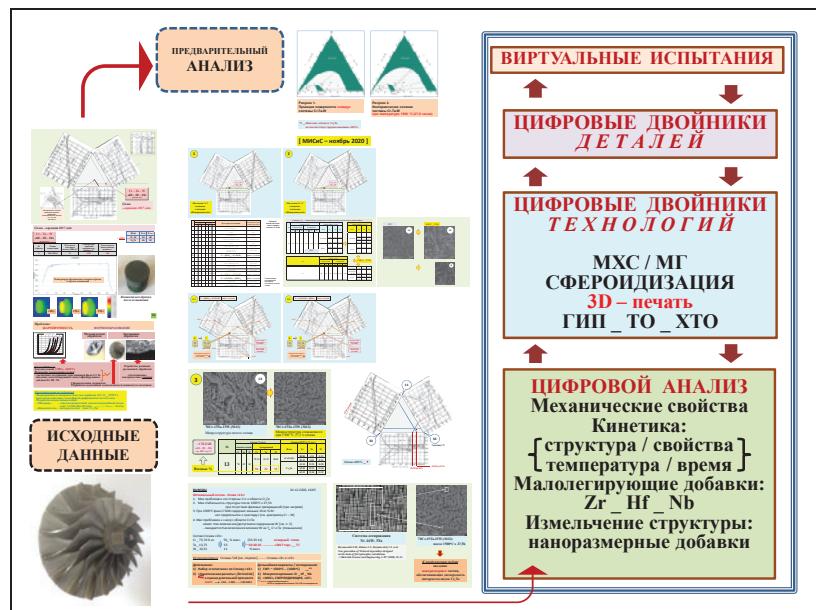
рекорд \_\_\_\_\_ 4 дня 15 часов 29 минут

1943 год \_\_\_\_\_ 3 судна в день









**Презентация сообщения чл.-корр. РАН Карпова Михаила Ивановича и начальника Отделения металлических материалов и металлургических технологий АО «Композит» д.т.н. Логачевой А.И. «Технология получения гранул из жаропрочных сплавов на основе тугоплавких металлов: Mo, W, Nb, Ta, основанная на газовой атомизации электродов, изготовленных методом вакуумной электронно-лучевой плавки»**

Технология получения гранул из жаропрочных сплавов на основе тугоплавких металлов: Mo, W, Nb, Ta, основанная на газовой атомизации электродов, изготовленных методом вакуумной электронно-лучевой плавки

**М.И. Карпов, А.И. Логачева**

Институт физики твердого тела РАН

г. Черноголовка, Московская обл.

[karpov@issp.ac.ru](mailto:karpov@issp.ac.ru)

ОАО «Композит»

г. Королев, Московская обл.

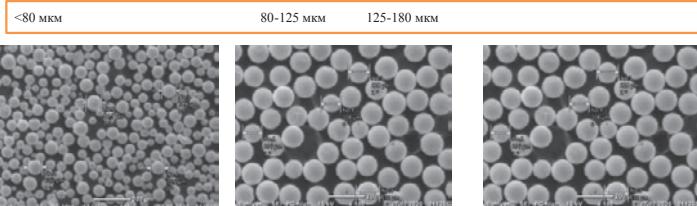
[ailogacheva@yandex.ru](mailto:ailogacheva@yandex.ru)

Технологическая схема изготовления гранул из высокочистых по вредным примесям сплавов на основе тугоплавких металлов



Гранулы из сплава ТСМ-7  
Прочность образцов при 1450°C – 100МПа

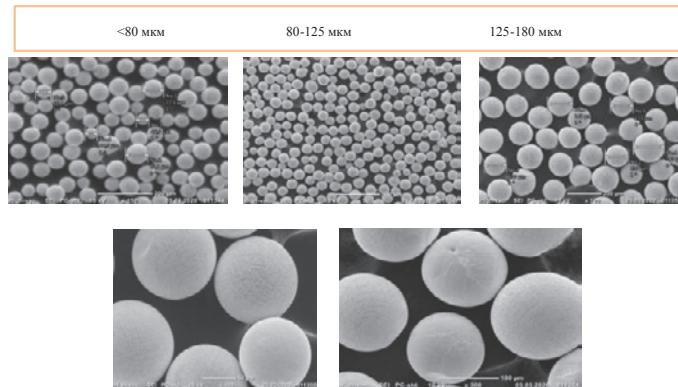
Гранулы получены методом газовой атомизации в АО «Композит»



Химический состав гранул Mo-99,31, Ta- 0,34, W-0,25, Ni-0,05, Nb-0,03, Cu-0,02, O-00039.  
O в слитке – 0,0020, O в электроде – 0, 0008 – 0,002

Гранулы из экспериментального сплава на основе молибдена  
Прочность образцов при 1450°C > 250МПа

Гранулы получены методом газовой атомизации в АО «Композит»



Преимущества предлагаемой гранульной технологии при производстве  
изделий из сплавов на основе тугоплавких металлов: Mo, W, Nb, Ta

1. Гранулы имеют высокую чистоту по наиболее вредной для тугоплавких металлов примеси – кислороду. Его содержание в гранулах снижается до уровня 10ppm, что обеспечивается электронно-лучевой вакуумной плавкой исходного слитка.
2. Масштаб всех структурных неоднородности гранул и распределения легирующих элементов в структуре определяется размером гранул.
3. Применение электронно-лучевой и/или вакуумной дуговой плавки позволяет изготавливать слитки практически любого состава, что решает технологические проблемы получения изделий из высокочистых сплавов на основе тугоплавких металлов.
4. Гранулы могут быть использованы для изготовления изделий сложной формы методами аддитивных технологий, что очень важно, ввиду высокой прочности сплавов и низкой технологичности при механообработке.
5. Гранулы могут быть использованы в качестве исходного материала при изготовлении изделий классическими методами порошковой металлургии. Это особенно важно при изготовлении крупно габаритных изделий из высокочистых тугоплавких сплавов.

Классическая металлургическая технология  
(разработка ИФТТ РАН)

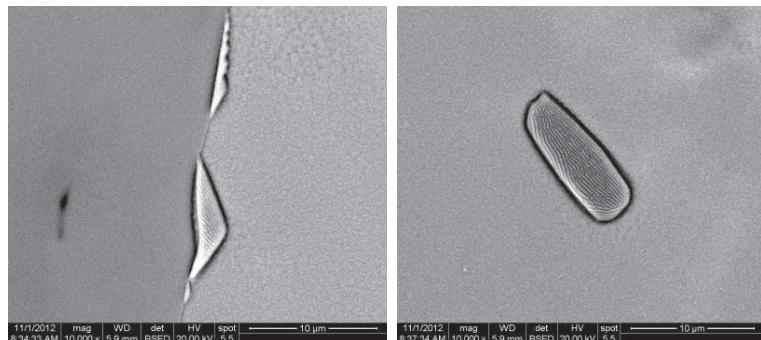
Исходная заготовка – слиток полученный методом вакуумной электронно лучевой плавки, вакуумной электродуговой плавки или их последовательным проведением  
(дуплекс процесс)



Макроструктура слитка сплава ТСМ-3 электронно-лучевой плавки



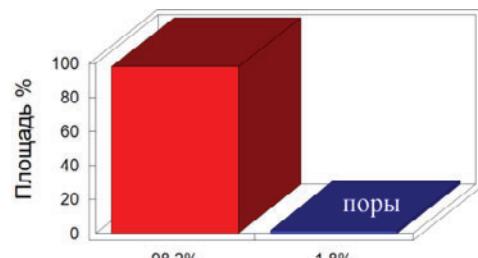
Детали структуры слитка сплава ТСМ-7  
Включения на границе зерен слитка и внутри них представляют собой эвтектику Mo-Mo<sub>2</sub>C



Образцы продукции из сплава ТСМ-7  
совместное производство ИФТТ РАН и АО ПОЛЕМА

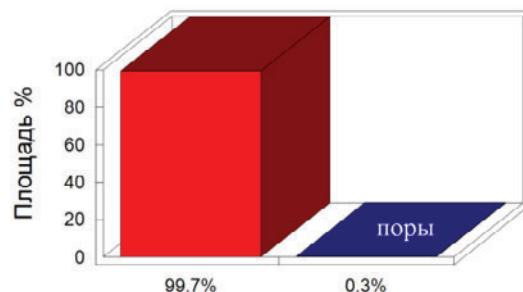
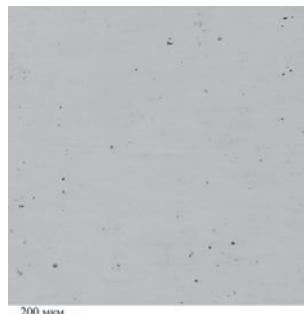


Структура после спекания



Размер зерна спеченной заготовки соответствует размеру гранул, что видно характеру распределения пор

## Структура после прокатки, толщина ленты - 2 мм



Образец прокатан до толщины 2 мм без  
образования трещин на кромках

## Заключение

Предлагаемая схема производства гранул позволяет решить наиболее сложные проблемы при разработке новых сплавов на основе тугоплавких металлов и технологии производства продукции из них и уже существующих сплавов.

Низкое содержание кислорода в гранулах и изделиях из них позволяет применять материалы в рекристаллизованном состоянии, что очень важно при использовании аддитивных технологий, а также использовать технологии сварки плавлением при изготовлении конструкций.

Презентация доклада ректора Санкт-Петербургского Государственного морского  
технического университета д.т.н., профессора Туричина Глеба Андреевича  
«Теоретические основы и перспективы промышленного применения технологии  
прямого лазерного выращивания»

ИЛИСТ СПбГМТУ

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРОМЫШЛЕННОГО ПРИМЕНЕНИЯ  
ТЕХНОЛОГИИ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ

Туричин Г.А., Земляков Е.В., Бабкин К.Д., Валдайцева Е.А., Климова О.Г.

29 июня 2021 г.

ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕХНОЛОГИИ

2

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ МАТЕРИАЛЫ – стали, никелевые, титановые, кобальтовые, медные сплавы и их комбинации

ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ ПРОЦЕССА – до 2,5 кг/ч (средняя – 1 кг/ч при плотности материала 8 г/см<sup>3</sup>)

РАЗМЕР ИЗДЕЛИЯ – максимальный диаметр 2100 мм, максимальная высота 1500 мм.

ТОЧНОСТЬ ИЗГОТОВЛЕНИЯ – 10-13 квалитет (+/- 1 мм на 2 м)

КАЧЕСТВО – пористость не более 0.01 об.%

МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

ПОРОШОК  
СОПЛО  
ЛАЗЕРНЫЙ ЛУЧ  
ЗОНА РОСТА



## ТЕРМОКАПИЛЯРНАЯ ГИДРОДИНАМИКА ВАННЫ РАСПЛАВА



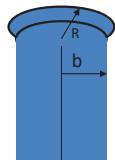
Boundary layer approach for Navier-Stokes equation

$$v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \quad v_x|_{z=0} = 0 \quad \eta \frac{\partial v_x}{\partial z}|_{z=H} = \frac{\partial \sigma}{\partial x} \quad \rightarrow \quad \eta \frac{\partial v_x}{\partial z}|_{z=H} = \frac{\sigma}{L} \frac{T_t - T_m}{T_v - T_m} = \frac{\sigma^*}{L}$$

Parabolic approximation for velocity profile

$$v_x(z) = v_x(\alpha + \beta z + \gamma z^2) \quad \rightarrow \quad v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - 3\nu \frac{v_x}{H^2} + \frac{3\sigma^*}{2\rho LH} \quad \frac{\partial}{\partial x}(v_x H) = \frac{j(x)}{\rho}$$

Scheme of cross-section of growing wall



Laplace pressure

$$p \approx \frac{\sigma}{b} - \frac{\sigma H^2}{2b^3}$$

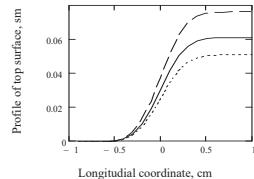
Continuity equation

$$\nu_x \frac{\partial v_x}{\partial x} = \frac{\sigma}{\rho b^3} \frac{H \partial H}{\partial x} - 3\nu \frac{v_x}{H^2} + \frac{3\sigma^*}{2\rho LH}$$

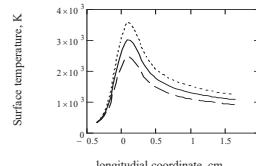
$H = 0$  when  $x = 0$ ,

$$\frac{\partial H}{\partial x}|_{x=0} = 0 \quad \frac{\partial H}{\partial x}|_{x=L} = 0$$

## ТЕПЛОПЕРЕНОС В ВАННЕ РАСПЛАВА

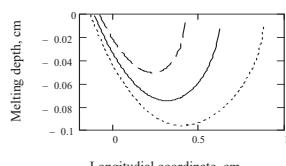


Inconel 625 deposition. Motion velocity 2 cm/c (solid), 2.4 cm/c (dot) and 1.6 cm/c (long dot), laser beam radius on the surface 2 mm, beam power 1770 W, powder jet diameter 3 mm, powder mass rate 3 kg/h, absorption coefficient 0.7.

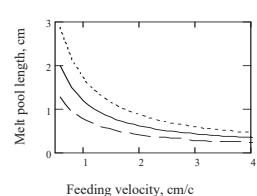


Temperature distribution along melt pool length for Inconel 625 deposition. Motion velocity 2 cm/c, laser beam radius on the surface 2 mm, beam power 1770 W (solid), 2130 W (dot) and 1420 W (long dot).

## ГЕОМЕТРИЯ ВАННЫ РАСПЛАВА



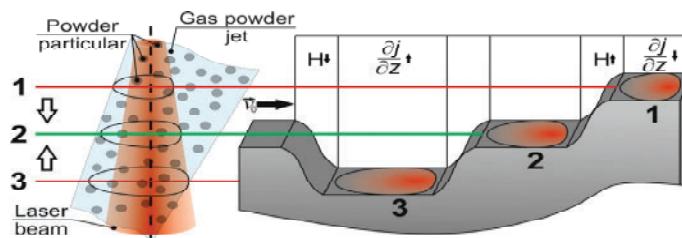
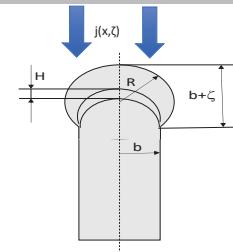
Melt pool shape for Inconel 625 deposition. Motion velocity 2 cm/c, laser beam radius on the surface 2 mm, beam power 1770 W (solid), 2130 W (dot) and 1420 W (long dot).



Melt pool length for Inconel 625 deposition. Motion velocity 2 cm/c, laser beam radius on the surface 2 mm, beam power 1770 W (solid), 2130 W (dot) and 1420 W (long dot).

### Гидродинамическая устойчивость процесса выращивания

$$2 \frac{\sigma H^2}{v_0 b^3 L} < \frac{\partial j}{\partial z} \text{ Условие устойчивости}$$



**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

3

Нелинейная квазистационарная задача теплопроводности

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + v_C \rho \frac{\partial T}{\partial x} = 0$$

Нормально распределенный эллиптический источник теплоты:

$$q_{2L}(x, y) = \frac{\eta}{\pi} \frac{q_L \sin \beta}{r_L^2} \exp \left[ -\frac{(x \sin \beta)^2 + y^2}{r_L^2} \right]$$

Уравнение равновесия жидкой фазы в поле сил тяжести:

$$\sigma \kappa = -\rho g z_o + C$$

Основные параметры: режимы выращивания, структура выращиваемой теллоидной оболочки, параметры расчетной процедуры

Модель взаимодействия лазерного излучения с газоподвижной струей и подложкой

Генерация трехмерной расчетной сетки

Инициализация - Инициализация + 7

Решение задачи теплопереноса в квазистационарной или нестационарной (динамической) постановке

Решение задачи формирования поверхности наплавленного слоя

Корректировка трехмерной сетки с учетом рассчитанной формы наплавленного слоя

До: Количество слоев достигло заданного значения?

Результаты расчета:

- параметры теплопереноса, плотности мощности источника теплоты и ядра
- кинетика температурного поля
- геометрия выращенного изделия

a) б) в) Влияние распределения плотности мощности (а, б) и скорости процесса на форму поперечного сечения (в)

4

**РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ**

Схема формообразования при ПЛВ

Повышение качества поверхности за счет сканирования лазерным лучом в процессе ПЛВ

Схема теплового источника

$$q_{2\max} = \frac{\eta \cdot q}{\pi \cdot R_b^2} \sqrt{\frac{\pi}{\pi + 2 \cdot n}} = q_{2m,n} \cdot k_A$$

Оптимизация технологических режимов

Форма ванны расплава при различных амплитудах сканирования

Со сканированием

Без сканирования

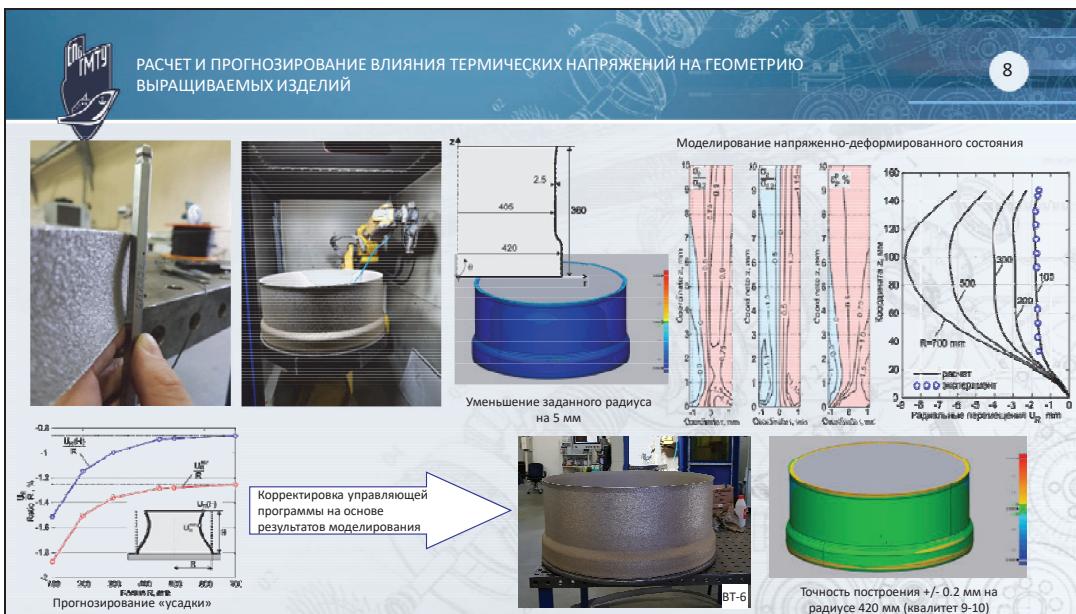
Фотографии поверхности образцов без сканирования и со сканированием.

Радиус пучка 1.25 мм



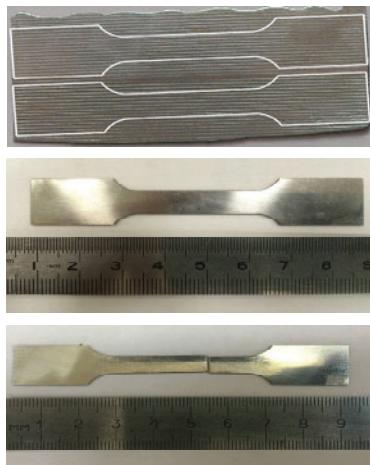
РАСЧЕТ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ГЕОМЕТРИЮ ВЫРАЩИВАЕМЫХ ИЗДЕЛИЙ

8



РЕЗУЛЬТАТЫ МЕХАНИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ

Сплав EuTroloy 16625M.04



УСТАЛОСТНЫЕ ИСПЫТАНИЯ

№ ступени нагру.	Напряжение, МПа	Наработка, циклов	Результат испытаний
1	210	$20 \times 10^6$	Не разрушился
2	230	$2 \times 10^6$	Не разрушился
3	250	$2 \times 10^6$	Не разрушился
4	270	$1.46 \times 10^6$	Разрушился

ИСПЫТАНИЯ НА РАЗРЫВ

Состояние	$\sigma_{0,2}$ , МПа	$\sigma_b$ , МПа	$\delta$ , %
без Термообработки	487	855	28,8
489	876	26,6	
после Термообработки (отжиг для снятия напряжения при $T=1000$ С, 3 часа)	454	870	31,9
Прокатанный (лист)	504	840	22,3
Отожженный	<b>414-758</b>	<b>827-1103</b>	30-60
Литой	<b>414-655</b>	<b>827-1034</b>	30-60
	<b>310</b>	<b>590</b>	<b>25</b>

Качество материала полученного методом лазерной гетерофазной порошковой металлургии соответствует прокату



РЕЗУЛЬТАТЫ МЕХАНИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ СПЛАВА ВТ-20

ИСПЫТАНИЯ НА РАЗРЫВ

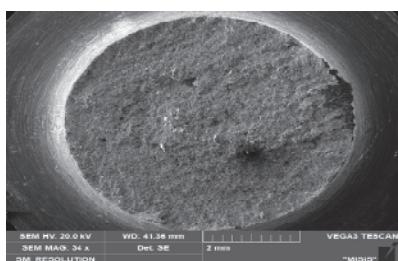
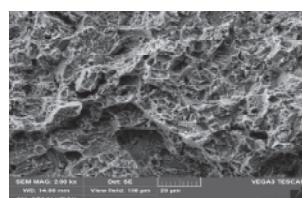
Состояние	T, °C	$\sigma_{0,2}$ , МПа	$\sigma_b$ , МПа	$\delta$ , %
Выращивание	20	<b>882</b>	968	6,6
	20	914	916	3,1
Выращивание + ГИП	350	<b>775</b>	<b>875</b>	<b>8,5</b>
	20	<b>885</b>	951	9,7
Литье (образец с $\sigma_b$ max)	20	<b>882</b>	935	8,4
	350	649	<b>740</b>	24,0
Литье + ГИП (образец с $\sigma_b$ max)	20	<b>876</b>	951	6,4 (13,2)
	350	<b>505</b>	<b>617</b>	13,7
Литье + ГИП (образец с $\sigma_b$ max)	20	<b>851</b>	943	<b>7,3 (9,0)</b>
	350	<b>482 (494)</b>	<b>618</b>	<b>17 (17,9)</b>

ДЛИТЕЛЬНАЯ ПРОЧНОСТЬ

Состояние	T, °C	Напряжение, кг/мм <sup>2</sup>	Время, часы
Выращивание	500	48	50 ч
Поковка (по ОСТ)	500	48	$\geq 50$ ч
Литье не испытывается			

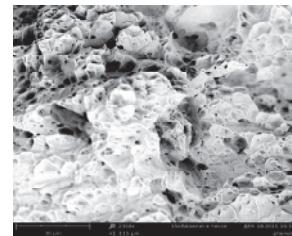
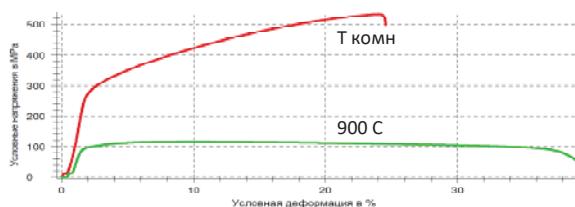


РЕЗУЛЬТАТЫ МЕХАНИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ  
СПЛАВА ЖС6-У



Предел прочности у материала, полученного методом гетерофазной порошковой лазерной металлургии на 22%, а относительное удлинение в 2,9 раза превышает характеристики литья

РЕЗУЛЬТАТЫ МЕХАНИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ  
ОБРАЗЦОВ ИЗ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ



Состояние поставки	Толщина, мм	Предел прочности, МПа	Предел текучести, МПа	Относительное удлинение, %
Выращенный образец, термообработанный, $T_{\text{вн}}=20^{\circ}\text{C}$	$D_{\text{раб.части}}=6 \text{ мм}$	532	271,8	20,1
Горячекатанный лист (AISI 316L)	Все размеры	515	205	40
Холоднокатанный лист (AISI 316L)	$h \leq 12,7$	620	310	30
Холоднокатанный лист (AISI 316L)	$h > 12,7$	515	205	30

Характер излома - вязкий

Материал	ПЛВ			ГОСТ			Стандарт
	$\sigma_b$ МПа	$\sigma_{0,2}$ МПа	$\delta$ %	$\sigma_b$ МПа	$\sigma_{0,2}$ МПа	$\delta$ %	
BT1-0	675	620	23	370-570	-	13	Плита 11-60, ГОСТ 23755-79
BT6	1026	925	14	885	-	8	Лист отожж., ГОСТ 22178-76
BT20	1160	1100	10	930-980	-	6-12	Лист отожж., ГОСТ 22178-76
ТЛ5	805	739	15	640	590	8	ОСТ 59.9071-88
ЭИ698	1100	781	24	1100	-	13	ОСТ 1 90330-82
Inconel 718	1293	1086	18	1100	-	8	Лист г.к., ТУ14-1-1582-75
BB751	1115	982	9	-	-	-	-
Inconel 625	865	489	28	870	450	44	-
12X18H10T	615	339	42	530	236	40	Лист т/к ГОСТ 7350-77
08X18H10T	631	295	57	509	206	43	Лист т/к ГОСТ 7350-77
316I	588	410	57	490	196	40	Лист толстый, ГОСТ 7350-77
09X16H45	1451	1167	13,5	1030	-	13	Лист толстый, ГОСТ 7350-77
ПР-09X14НЧБ	1451,4	1167,0	13,5	-	-	-	-
ПР-28Х3СНМВФА	1667	1069	11	1570	-	7	Листы т/к ТУ 14-1-4461-88

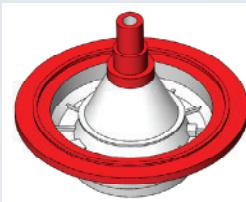
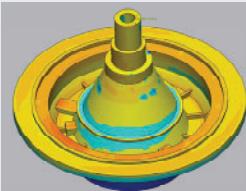
МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ



## ПРИМЕРЫ ИЗДЕЛИЙ

4

**Корпус подшипника 67.04.50.004**

<b>3D модель заготовки</b> 	<b>Заготовка</b> 	<b>Механическая обработка</b> 
<b>Контроль геометрии</b> 	<b>Целевое изделие</b> 	<p>Масса целевой детали – 9,3 кг  Диаметр – 324 мм  Высота – 201 мм  Масса выращиваемой заготовки – 13 кг  Припуски под мехобработку 0,5-2 мм  Время изготовления – 20 часов  Гибридная технология изготовления</p>

## ПРИМЕРЫ ИЗДЕЛИЙ

5

		<p><b>Изделие: Кольцо наружное от двигателя ПД-14</b>  <b>Максимальный диаметр:</b> 2070 мм.  <b>Высота:</b> 250 мм.  <b>Материал:</b> порошок ВТ-6  <b>Масса наплавленного материала:</b> 86 кг.  <b>КИМ:</b> &gt;70 %  <b>Время выращивания:</b> 128 часов</p>	
			

**ОТРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ СУДОВЫХ ДВИЖИТЕЛЕЙ И СУДОВОЙ АРМАТУРЫ**

Уникальный идентификатор проекта  
RFMEFI57417X0175

6а

**ПРИМЕРЫ ИЗДЕЛИЙ**

7

**ПРИМЕР ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГИБРИДНЫХ КОНСТРУКЦИЙ**

15

**ИЗГОТОВЛЕНИЕ ВЫСОКОТОЧНЫХ ЗАГОТОВОК ДЕТАЛЕЙ КОМПОНЕНТОВ РАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ**

АО Корпорация Техническое Ракетное Воздоружие  
ПАО ТМКБ «СОЮЗ»

**ПРИМЕРЫ ИЗДЕЛИЙ**

8

- Масса изделия: 16,5 кг
- Масса заготовки: 41 кг
- Размеры: Ø520 x h210
- Материал: InC718
- Время выращивания: 96 ч.

- Масса изделия: 4,7 кг
- Масса заготовки: 12 кг
- Размеры: Ø570 x h100
- Материал: InC718
- Время выращивания: 24 ч.
- 4-х осевая стратегия

**ПРИМЕРЫ ИЗДЕЛИЙ**

9

- Масса изделия: 4,2 кг
- Масса заготовки: 7 кг
- Размеры: Ø520 x h130
- Материал: InC718
- Время выращивания: 13 ч.

- Масса изделия: 104 кг
- Масса заготовки: 120 кг
- Размеры: Ø544 x h1298
- Материал: InC718
- Время выращивания: 130 ч.

**РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСТАНОВОК**

16

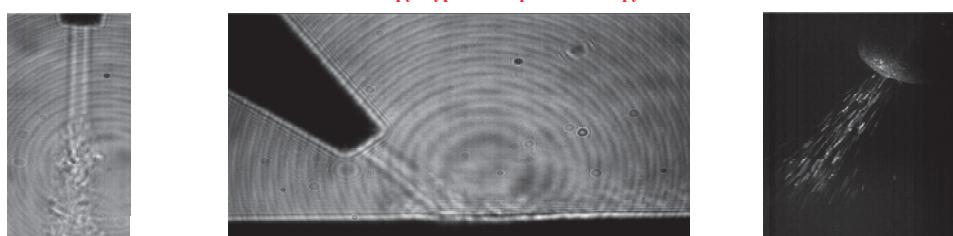
BeAM Machines

Insstek

DMG Mori

### ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПЕРЕНОСА ПОРОШКА

Структура газопорошковой струи

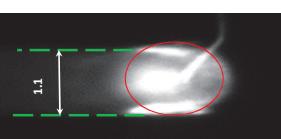


Исследовательский стенд

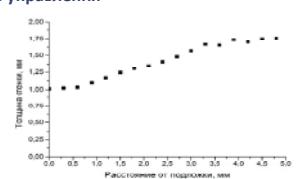


### МЕТОД КОНТРОЛЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПРЯМОГО ЛАЗЕРНОГО ВЫРАЩИВАНИЯ

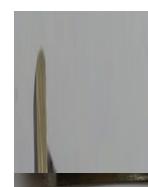
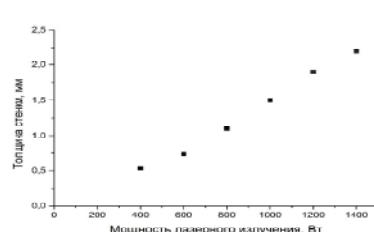
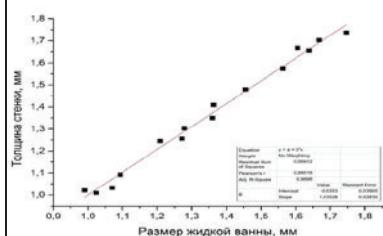
Без адаптивного управления



Контроль геометрии ванны расплава

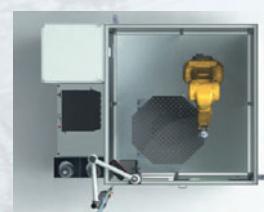


С адаптивным управлением мощностью лазерного излучения



### Прямое лазерное выращивание: Оборудование

10



Среднегабаритная установка ПЛВ:

- Манипулятор: робот + 2x осевой позиционер
- Максимальный размер изделия:  $\varnothing 1300$  мм,  $h=800$ мм
- Производительность на сплавах Ti: до 1,25 кг/ч
- Производительность на сплавах Fe, Ni, Co: до 2,5 кг/ч
- Контролируемая атмосфера чистого Аргона
- Волоконный лазер ЛС-3: 3 кВт
- Порошковый питатель: 2 x 5 л



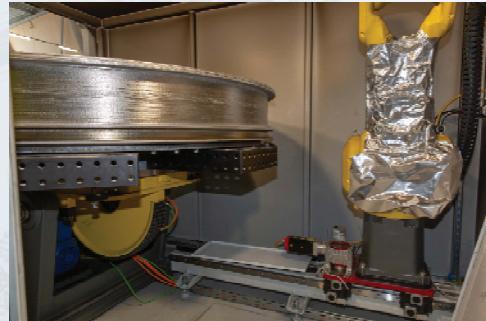
## Технологический комплекс прямого лазерного выращивания

28



Механическая структура

- Робот M20iB/25 (Контроллер R30iB-Plus)
- Двухосевой позиционер Technorobot TR4501-150
- Линейная ось Gudel TMF-1

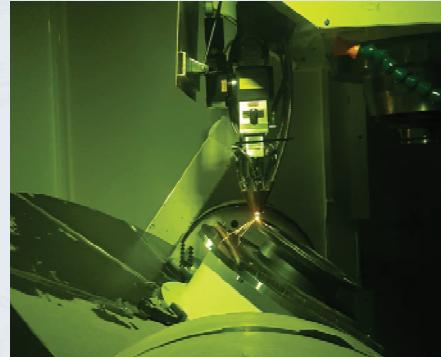


- Контролируемая атмосфера аргона ( $O_2 < 100 \text{ ppm}$ )
- Максимальный размер изделия:  $\phi 2200 \text{ mm}$
- Волоконный лазер ЛС-3 (3 кВт)
- Технологический инструмент с коаксиальным соплом
- Порошковый питатель: 2 колбы по 5 л.



## ПРЯМОЕ ЛАЗЕРНОЕ ВЫРАЩИВАНИЕ: ГИБРИДНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

26

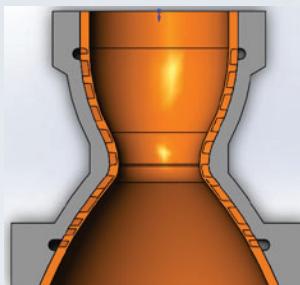


- 5-ти осевая кинематика, с синхронной интерполяцией
- Фрезерно-точная функция
- Максимальный размер изделия:  $\phi 1100 \text{ mm}, h=600\text{mm}$
- Производительность на сплавах Fe, Ni, Co: до 2,5 кг/ч
- Локальная газовая защита
- Порошковый питатель 2 x 5 л



## ВЫРАЩИВАНИЕ: БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ КОНСТРУКЦИИ

11



Целевое изделие

- Масса заготовки: 6.6 кг
- Размеры:  $\phi 160 \times h150$
- Материал: БрХ08 + сталь
- Минимальная толщина стенки 1.1 мм



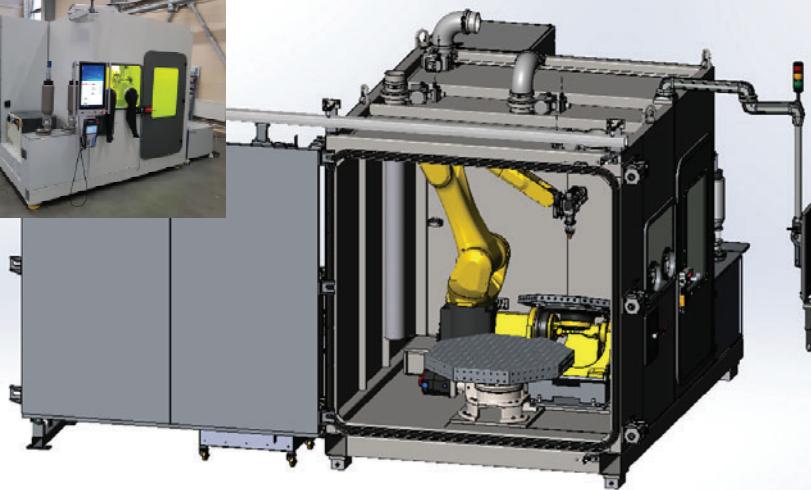
Демонстратор

- Масса заготовки: 0,7 кг
- Размеры:  $\phi 100 \times h30$
- Материал: CuNiAl + Inc625
- Минимальная толщина стенки 1.1 мм



## МОДЕРНИЗАЦИЯ ОБОРУДОВАНИЯ

12

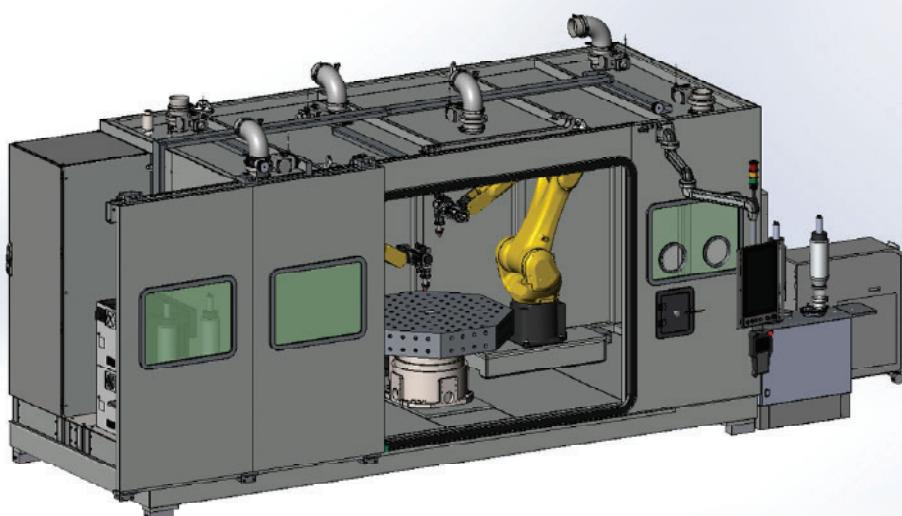


### Установка ИЛИСТ-Л+:

- Манипулятор: робот
- + 2x осевой позиционер (500 кг)
- + 1-осевой позиционер (1000 кг)
- Максимальный размер изделия: Ø 1500 мм, h=800мм
- Волоконный лазер: 3 кВт
- Порошковый питатель: 2 x 5 л
- Герметизируемые ворота для выгрузки габаритных готовых деталей

## РАЗВИТИЕ МОДЕЛЬНОГО РЯДА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

13



Максимальный размер изделия: Ø 2000 (3500) мм, H1000 мм  
Количество технологических инструментов: 2  
Порошковые питатели: 2x2х5л  
Используемые лазерные источники: 2x4кВт  
Грузоподъемность позиционера: 8 000 кг



## РАЗВИТИЕ МОДЕЛЬНОГО РЯДА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

14

- Максимальный размер изделия: Ø **4000** мм, H **2000**
- Материал: **алюминиевые сплавы**



## ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕХНОЛОГИИ

15

ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ МАТЕРИАЛЫ – стали, никелевые, титановые, кобальтовые, медные сплавы и их комбинации

Расширение номенклатуры материалов

(жаропрочные бронзы и алюминиевые сплавы, градиентные материалы, ВЭСы, металло-композиты, проволоки)

Использование лазерного излучения видимого диапазона

ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ ПРОЦЕССА – до 2,5 кг/ч (средняя – 1 кг/ч при плотности материала 8 г/см<sup>3</sup>)

Увеличение количества синхронно работающих технологических головок

РАЗМЕР ИЗДЕЛИЯ – максимальный диаметр 2100 мм, максимальная высота 1500 мм.

Проектирование технологических комплексов с рабочей зоной диаметром до 4 м и высотой до 2 м

ТОЧНОСТЬ ИЗГОТОВЛЕНИЯ – 10-13 квалитет (+/- 1 мм на 2 м)

Развитие методик прогнозирования термических деформаций при выращивании крупногабаритных изделий

КАЧЕСТВО – пористость не более 0.01 об.%, шероховатость – Ra6,3 мкм

Методология контроля сырья. Оптимизация технологических процессов изготовления готовых изделий

МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Аттестация технологий и материалов

Презентация доклада и.о. проректора по научно-исследовательской работе  
Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова  
д.х.н., профессора Хашировой Светланы Юрьевны  
«Полимерные материалы в аддитивных технологиях.  
Современное состояние и перспективы развития в Российской Федерации»



**Полимерные материалы в аддитивных технологиях.  
Современное состояние и перспективы развития  
в Российской Федерации**

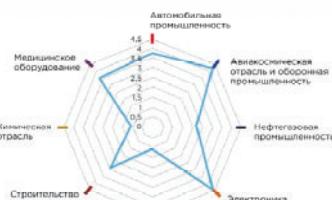
Хаширова С.Ю.

Кабардино-Балкарский государственный университет им.Х.М. Бербекова  
проректор по НИР, зав. кафедрой органической химии и ВМС,  
д.х.н., профессор

Москва, 29 июня 2021 года

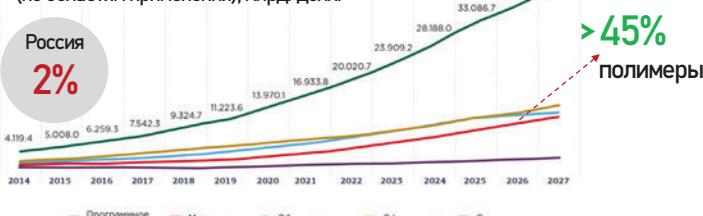
**Аддитивные технологии – современное состояние**

Уровень внедрения 3D-печати по отраслям к 2025 году



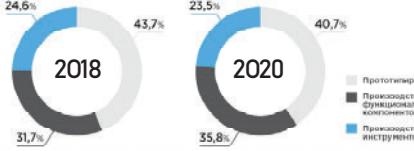
Источник: Global Additive Manufacturing Market, Forecast to 2025: <http://namic.sg/wp-content>

Динамика и прогноз объема рынка аддитивных технологий  
(по областям применения), млрд. долл.



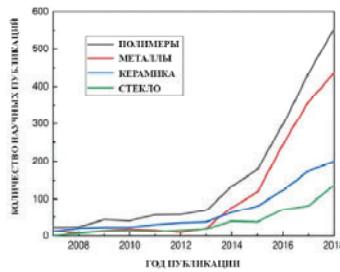
Источник: SmarTech Publishing

Рынок 3D-печати в разрезе приложений

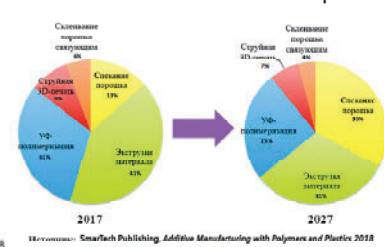


Источник: MarketsAndMarkets, 2020

Количество публикаций по годам в области 3D печати



Прогноз использования технологий 3D печати с использованием полимеров



Источник: SmarTech Publishing, Additive Manufacturing with Polymers and Plastic 2018

## Аддитивные технологии - преимущества



### Преимущества технологий:

- Гибкость производства: не нужна оснастка, быстрая перенастройка, одинаковая цена единичных и серийных изделий;
- Сложная форма изделий, бионический дизайн (снижение веса, улучшение эксплуатационных характеристик);
- Конформное охлаждение;
- Комплексность изделий (объединение нескольких деталей в одну, снижение сложности сборки).

в 3–8 раз снижение трудозатрат

до 10 раз снижение расхода материала

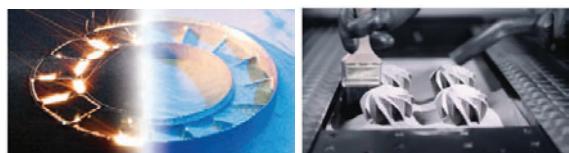
до 90 % снижение издержек производства

### Принципиальная схема аддитивного производства



до 75% снижение сроков

выхода новых продуктов на рынок



## Полимерные материалы в аддитивных технологиях

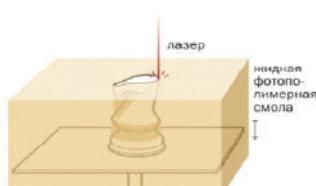
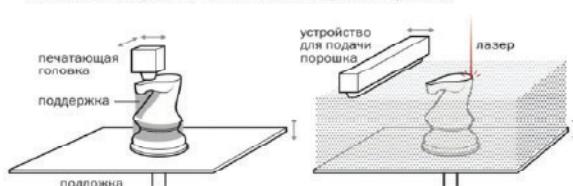
### АДДИТИВНАЯ ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИМЕРОВ



4

## Аддитивные технологии – методы

Под термином «3D-печать» понимаются разные технологии, объединенные общим принципом: создание нового объекта происходит за счет послойного нанесения материала. Методы различаются стоимостью, скоростью, точностью и выбором материалов.



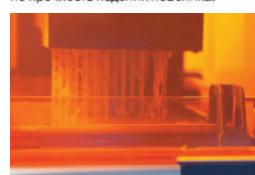
**Моделирование методом наплавления**  
Пластик подается в принтер в виде прутка, плавится и слой за слоем наносится на подложку, где снова застывает. Процесс настолько прост, что его можно адаптировать для офисных устройств печати.



**Селективное лазерное спекание**  
Лазер проходит над порошком из пластика или металла, выборочно припавая крупинки к нижнему слою. Такая технология позволяет работать с самыми разными материалами.



**Стереолитография**  
Жидкая фотополимерная смола затвердевает под воздействием лазера или пучка ультрафиолета. За счет этого достигаются быстрая печать и хорошее разрешение, но прочность изделий невелика.



5

## Аддитивные технологии – метод стереолитографии



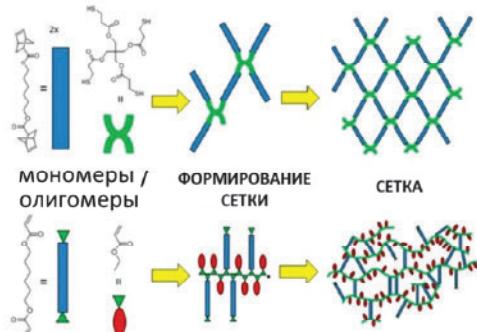
Фотополимеризация – процесс, в котором жидкий фотополимер выборочно отверждается (полимеризуется) в ванне световым излучением



- стереолитография (SLA),
- двухфотонная (2PP),
- цифровая обработка светом (digital light processing, DLP)

6

## Аддитивные технологии – метод стереолитографии



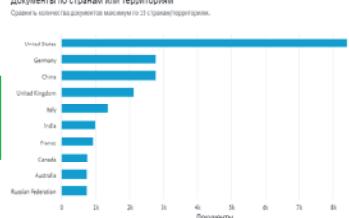
+ Целенаправленно комбинируя олигомеры в различных соотношениях, можно менять как свойства фоточувствительной композиции (ФПК), так и свойства конечного материала

**ФПК традиционная** = олигомеры(мономеры)+фотоинициатор  
**ФПК для 3D-печати** = олигомеры(мономеры)+  
 фотоинициатор + краситель для ограничения слоя

Scopus



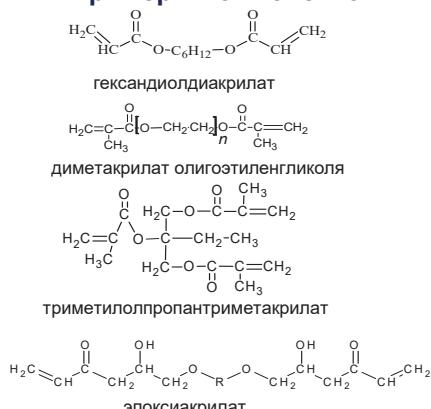
Документы по странам или территориям



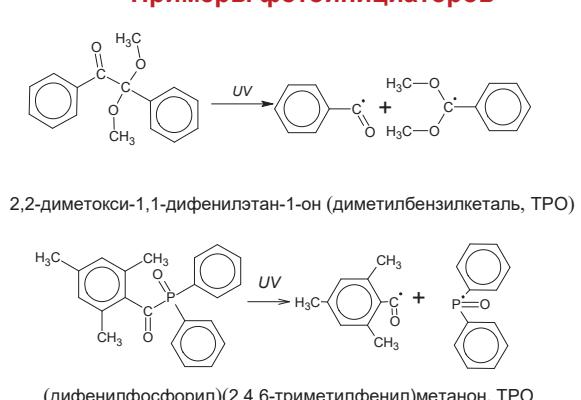
7

## Метод стереолитографии - материалы

### Примеры компонентов



### Примеры фотоинициаторов



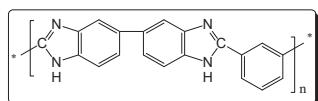
Требования к компонентам: низкая вязкость (1495 мПа·с и меньше), отсутствие летучих компонентов и фазового разделения

8

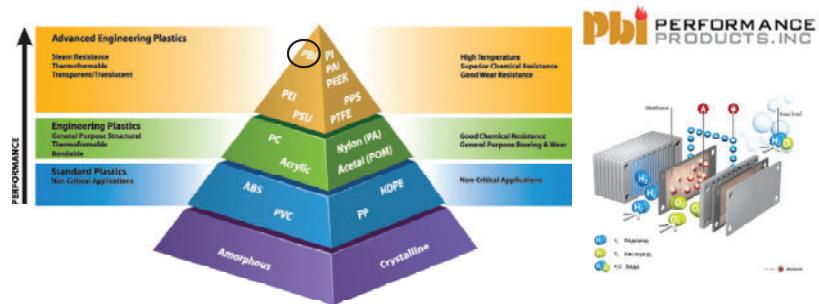
## Метод стереолитографии – перспективные материалы

### Полибензимидазолы (ПБИ)

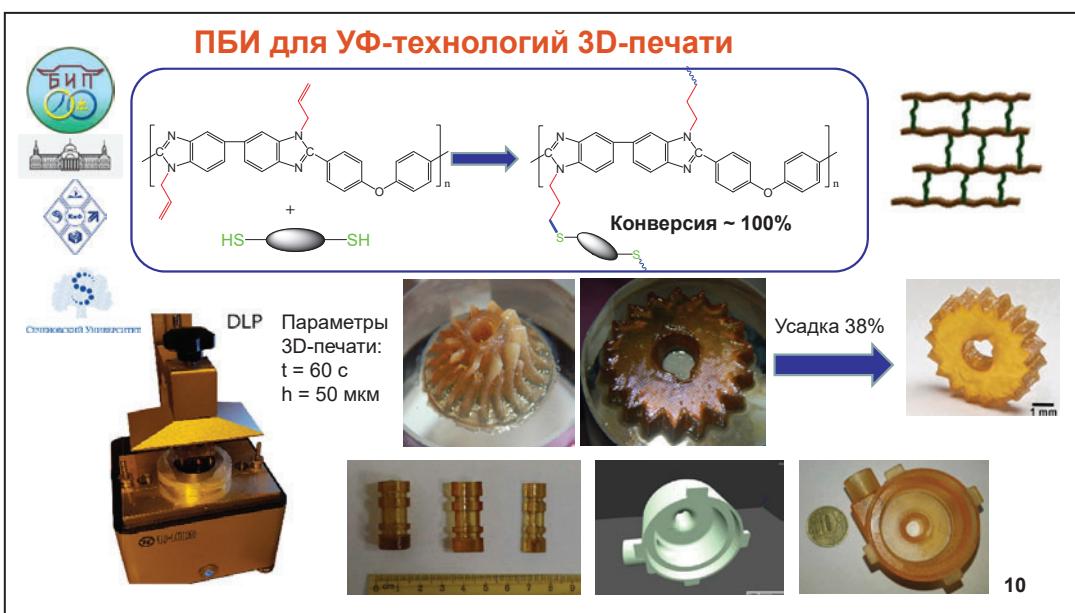
- ❖ Высокая тепло- и термостойкость;
- ❖ Высокая механическая прочность и жесткость в широком температурном диапазоне;
- ❖ Огнестойкость;
- ❖ Стойкость к излучению с высокой энергией.



ПБИ «Celazole»



9



### Физико-механические и термические свойства фотоотверженных материалов на основе ПБИ

Полимер	Тиол	Прочность на разрыв, МПа	Удлинение при разрыве, %	T <sub>g</sub> , °C	T <sub>10%</sub> , °C
		$63.6 \pm 3.1$	$64.3 \pm 5.8$	224	412
		$148.1 \pm 5.2$	$13.9 \pm 1.4$	367	489
		$159.8 \pm 6.1$	$15.2 \pm 2.1$	371	495
	–	$126.5 \pm 4.8$	$20.2 \pm 2.4$	352	511

11

## Метод стереолитографии – проблемы и перспективы



12

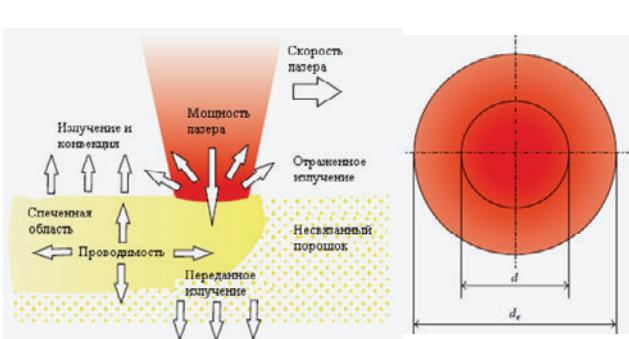
## Аддитивные технологии – метод селективного лазерного спекания



13

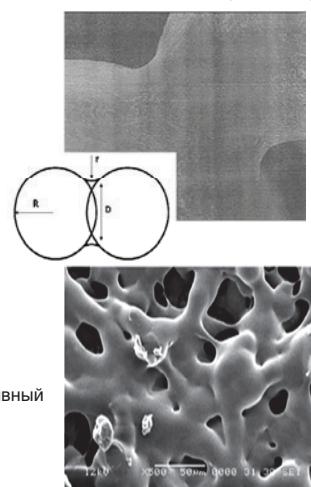
## Аддитивные технологии – метод селективного лазерного спекания

Воздействие лазерного луча на материал



Воздействие лазерного луча на материал

Спекание и сплавление частиц полимерного порошка

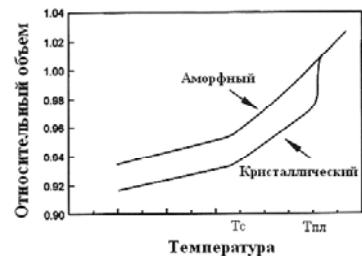


14

## Метод селективного лазерного спекания – материалы

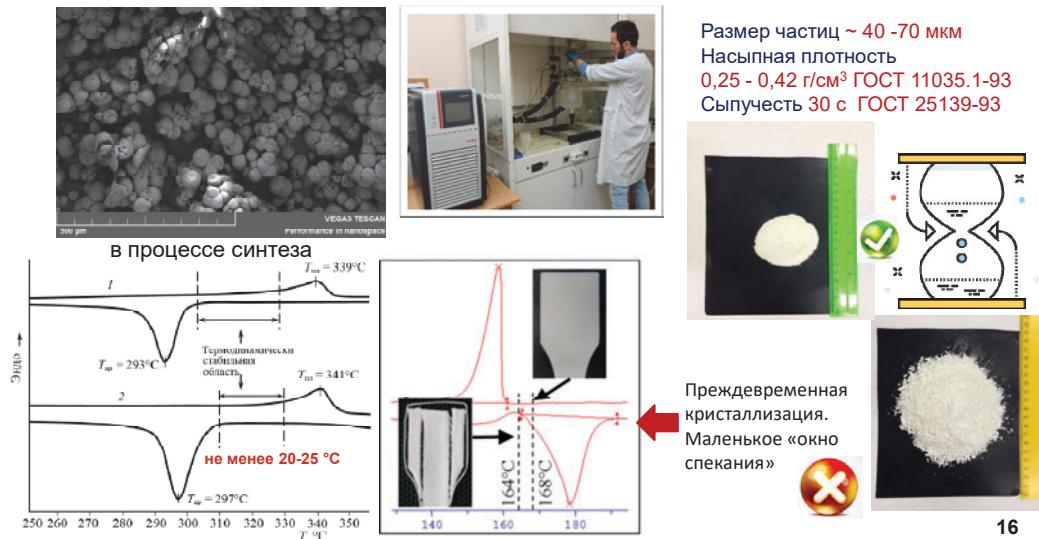


Сокращение объема полимера при охлаждении



15

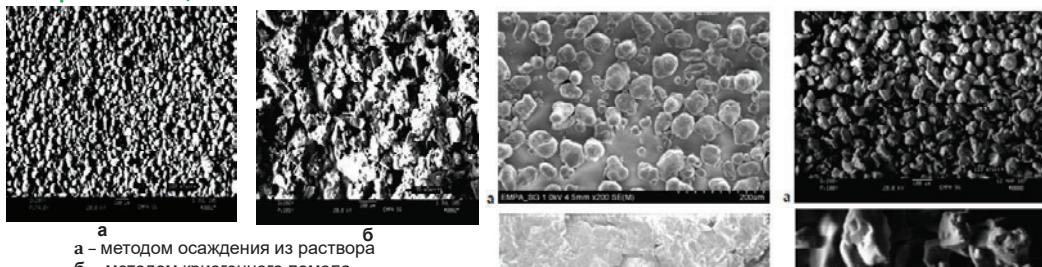
## Метод селективного лазерного спекания – материалы



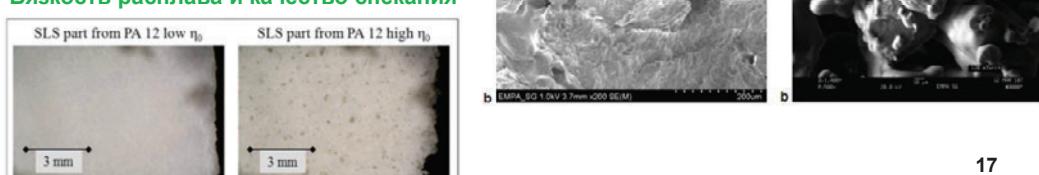
16

## Метод селективного лазерного спекания – материалы

### Формы частиц и качество спекания



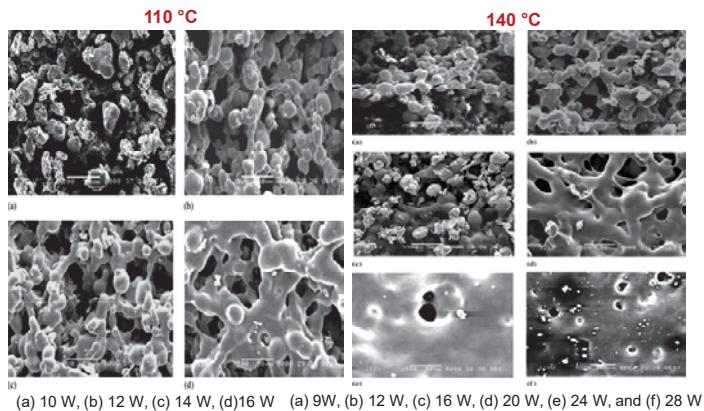
### Вязкость расплава и качество спекания



17

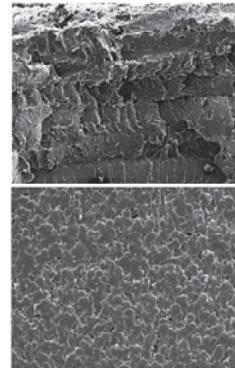
## Метод селективного лазерного спекания – материалы

Снимки СЭМ ПЭЭК 150 XF при температуре подогрева порошка



Температура подогрева порошка и качество спекания

Спекание PEEK HP3  
при стандартных режимах  
EOSINT P800

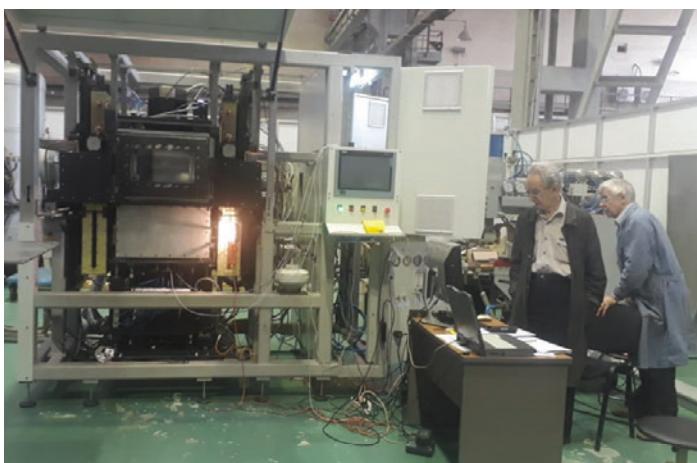


Система использует температуру подогрева равную **366 °C**

18

## Метод селективного лазерного спекания – оборудование

 ФОНД  
ПЕРСПЕКТИВНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

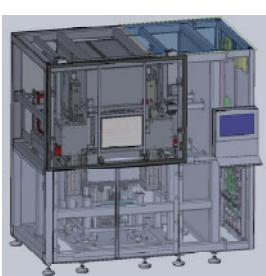


Разработка первого в РФ  
образца аддитивного  
оборудования для  
селективного лазерного  
спекания  
высокотермостойких  
полимеров



19

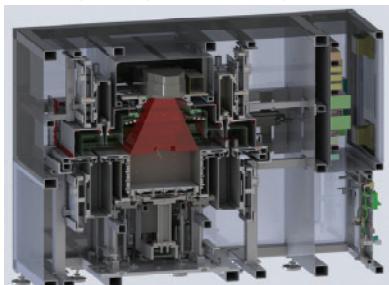
### УСТАНОВКА ПОСЛОЙНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ «ЭЛЬБРУС»



Преимущества: позволяет уменьшать зону спекания для изготовления лабораторных образцов, подходит для проведения исследований процесса и материалов



Ближайший аналог: Electro Optical Systems P800 (Германия)- минимальная загрузка 10 кг



Порошковые материалы:  
Порошки на основе полизифиркетонов, композитов и нанокомпозитов на основе полизифиркетонов.

Максимальная мощность лазера, Вт	80
Диаметр лазерного пятна, мкм	150
Толщина слоя, мкм	10 .. 200
Размер рабочей зоны, мм	500 x 500 x 300
Наибольшая масса детали, кг	200

20

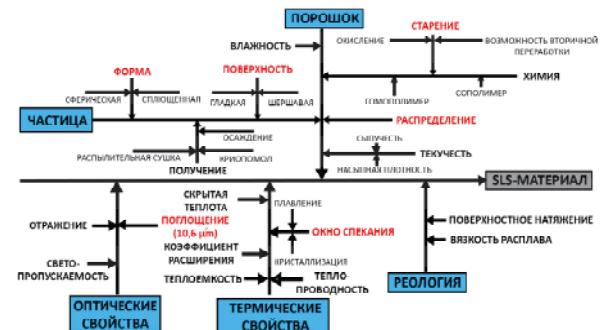
## Метод селективного лазерного спекания – проблемы и перспективы

### Проблемы

Высокая стоимость материалов и оборудования. Полиамид 12 (PA 12) - основной и почти эксплуативный вариант. Полимерные порошки для 3D в стране не производятся. Оборудование для спекания перспективных высокотемпературных порошков недоступно. Необходимо развивать исследования в области получения порошков нужной структуры, размера, сферичности и сыпучести. Существует проблема пористости и высокой шероховатости изделий. Высокий расход материала. Первый слой необходимо формировать из подобного материала для снижения термических эффектов. Каждый последующий эксперимент требует чистки всей камеры. Для предотвращения окислительных эффектов необходимо использовать инертную среду.

### Перспективы

- + Возможность моделировать сложнейшую геометрию (как внутренних элементов, так и целого изделия).
- + Для построения сложных деталей не используется материал поддержки, исключается риск повреждения напечатанной детали.
- + Высокая точность печати
- + Растущая отрасль
- + Возрождение малотоннажной химии в РФ

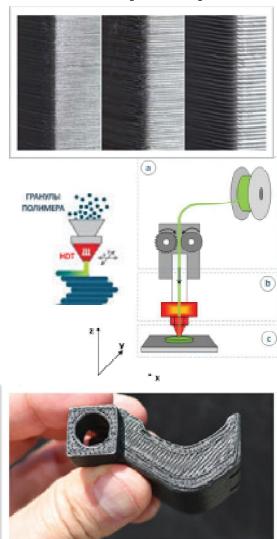


Комплекс свойств перспективного SLS-материала

Для развития технологии SLS необходимо расширение ассортимента полимерных порошков, в том числе, кристаллических полиолефинов ПП, ПЭ

21

## Аддитивные технологии – метод послойного сплавления нити (FDM)



ПОСЛОЙНОЕ НАНЕСЕНИЕ РАСПЛАВЛЕННОЙ ПОЛИМЕРНОЙ НИТИ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ИЗДЕЛИЯ

22

## Отечественные производители 3D принтеров для полимеров



- Технология печати: FDM
- Материалы: BS, FORMAX, PLA, HIPS, ULTRAX, ULTRAL, G3D, ASA, ABS/PC, PET, PC, FRICTION, CAST, RELAX, EXTERNAL, FLEX, RUBBER, SEALANT, PETG, AEROTEX, CERAMO, WAX, SBS, SBS PRO, PROTOTYPER, SOFT, PRO-FLEX, TOTAL PRO, NYLON, PEEK



Рабочая камера: 360x360x610 мм



- Технология печати: FDM, SLS, ULTRAX, ULTRAL, G3D, ASA, ABS/PC, PET, PC, FRICTION, CAST, PC-ISO, PEEK, ULTEM 9085/1010, PEI, PSU, PC, PA12, TPU



Рабочая камера: 950x650x950 мм



- Технология печати: FDM
- Материалы: PETG, ABS, HIPS, ASA, PET, POM, PEEK, PEKK, PEI, PEK, PPSF, PPSU, PSU, ULTEM



Рабочая камера: 500x450x700 мм

ООО «ВОЛТЕХНО»



- Технология печати: SLA
- Материалы: фотополимер, фотополимерная смола



Рабочая камера: 124x70x180 мм



- Технология печати: FFF
- Материалы: PLA, PETG, ABS, HIPS, ASA, PET, PEEK, PRSU, PEI



Рабочая камера: 2000x1200x1200 мм



- Технология печати: FDM
- Материалы: ABS, PLA, HIPS, Гибкие материалы (Rubber, FLEX), BF Bronze, Carbon, Nylon



Рабочая камера: 300x300x400 мм



- Технология печати: FDM, CFC
- Материалы: PETG, Carbon Fiber, PLA, ABS



Рабочая камера: 420 x 297 x 210мм



- Технология печати: SLS
- Материалы: PA11, PA12, TPU-85A



Рабочая камера: 330x330x450 мм

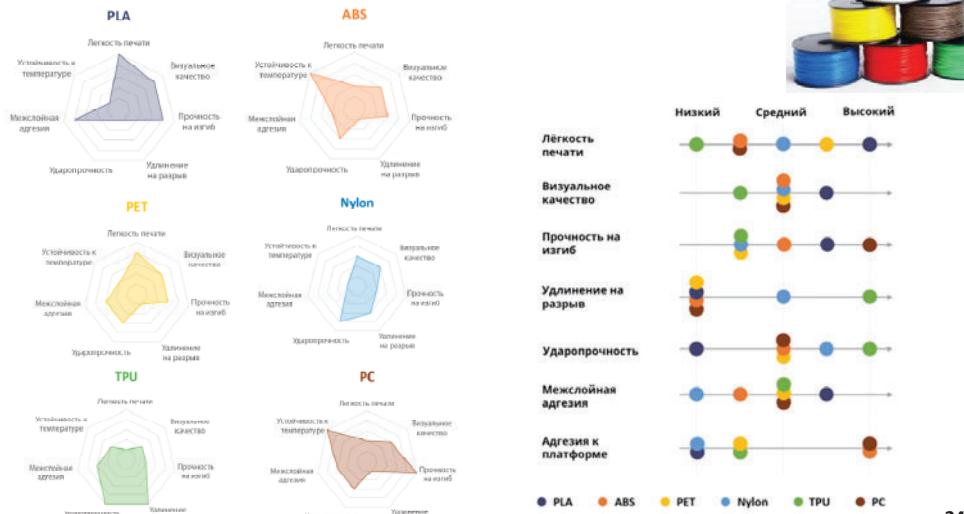


- Технология печати: DLP, SLA
- Материалы: фотополимер, фотополимерная смола



Рабочая камера: 52,8x29,7x150 мм

## Метод послойного сплавления нити (FDM) - материалы



24

## Высокотемпературные полимеры для FDM-ПЕЧАТИ



25

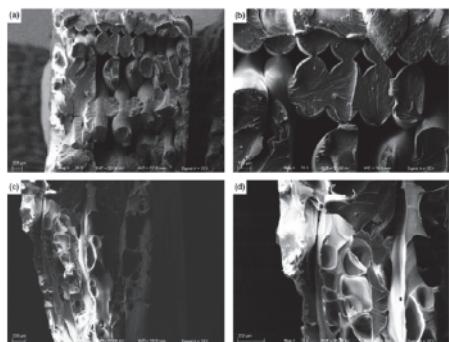
## Оборудование для 3D печати изделий из PEEK, PPSU, ULTEM 9085



26

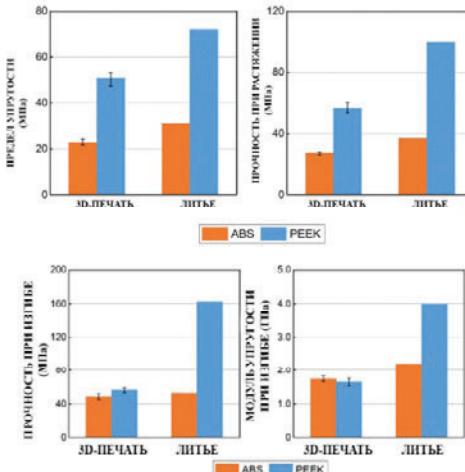
## Метод послойного сплавления нити (FDM) - материалы

FDM – печать аморфных и кристаллизующихся полимеров



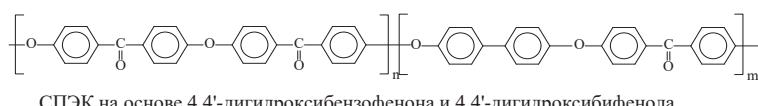
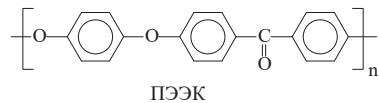
СЭМ-изображения поперечных срезов:  
(а,б) АБС (с,д) ПЭЭК

Сравнение свойств АБС и ПЭЭК  
литьевые и напечатанные образцы



27

## Метод послойного сплавления нити (FDM) - материалы

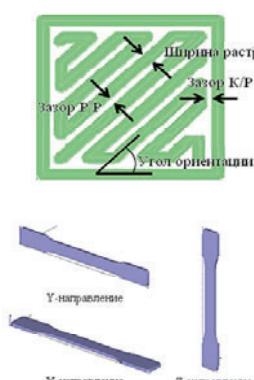


Состав	Еизг, МПа	Ераст, МПа	$\sigma_r$ , МПа	$\sigma_t$ , МПа	$\varepsilon_p$ , %
ПЭЭК литьё	3740	2970	104,6	96,2	86,0
ПЭЭК печать	3900	3100	43	-	1,6
СПЭК-50 литьё	2850	2700	98,5	97	81
СПЭК-50 печать	3120	2500	67,0	-	4,4

28

## Метод послойного сплавления нити (FDM) – режимы печати

Регулируемые параметры печати в методе FDM

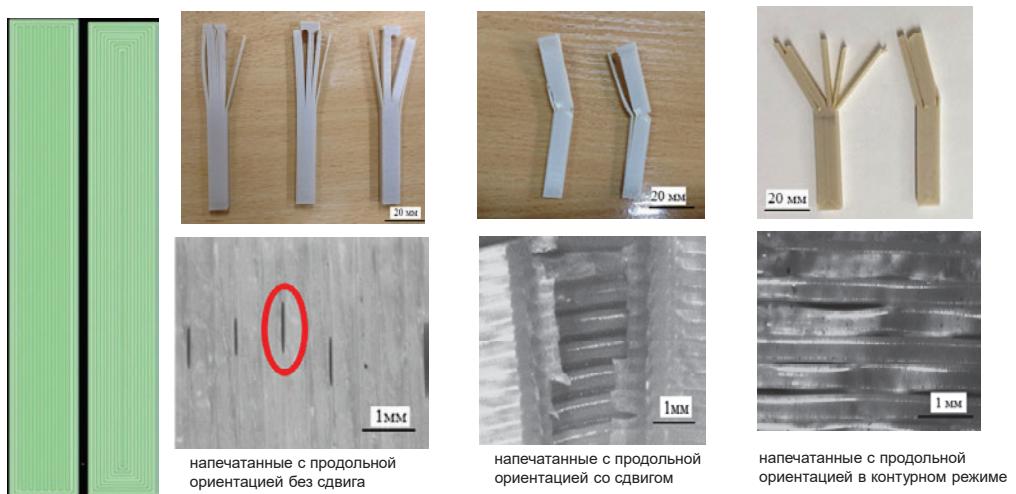


СОСТАВ	$A_p$ , кДж/м <sup>2</sup>		Е изг, МПа	Е раст, МПа	$\sigma$ разр, МПа	$\sigma$ тек, МПа	$\varepsilon$ , %
	б/н	с/н					
PPSU-литьевой	не разр.	20	2420	1620	60	76	30
P/P=0 (45/45°)	25	17	1875	1395	35	-	5
P/P=-0,025 (+45/-45°)	60,5	7,4	2190	1605	42	-	6
P/P=-0,054 (+45/-45°)	55,5	10,5	2470	1830	49	-	6
P/P=0 (по 15°)	20	4,2	1800	1440	30	-	5
P/P=-0,025 (по 15°)	21	8,5	2050	1590	38	-	6
P/P=-0,054 (по 15°)	23	9,9	2460	1820	46	-	6
P/P=0 (0°)	86	80	2280	1585	48	-	5
P/P=-0,025 (0°)	не разр	10,5	2410	1725	64,5	-	4
P/P=-0,054 (0°)	не разр	12	2415	1780	50	-	6

29

## Метод послойного сплавления нити (FDM) – режимы печати

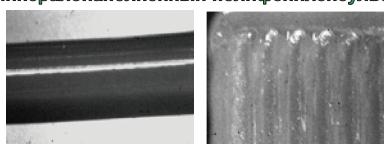
Образцы из полифениленсульфона, напечатанные в разных режимах после испытаний на ударную вязкость



30

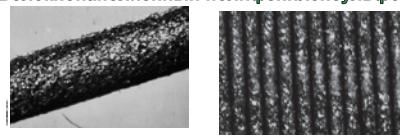
## Метод послойного сплавления нити (FDM) – композиты

### Минералонаполненный полифениленсульфон

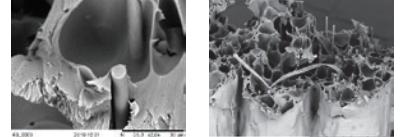


Нить и напечатанный образец с содержанием талька

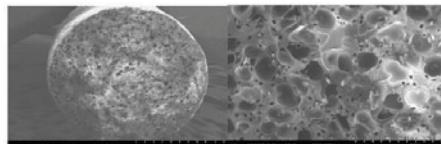
### Волокненаполненный полифениленсульфон



Нить и напечатанный образец с содержанием 10% УВ

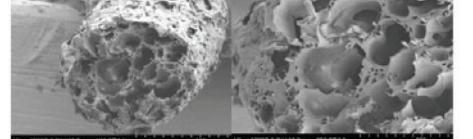


### Снимки нитей Ultem+10% УВ



Properties	Ultem 9085 Inherent Molded (Sabic data)	Ultem 9085 Printed Filament (Stratasys data) 0°	Ultem 9085 Inherent Molded (Sabic data) 45°	Ultem 1000 Inherent Molded (Sabic data) 0°/45°	Ultem 1000+10% Additive Inherent Molded (Sabic data) 0°/45°
Tensile Strength (MPa)	83	72	62 ± 0.1	110	50±0.9/44±3
Tensile Modulus (MPa)	3,432	2,200	2,230 ± 12	3,579	2,901±48/2248±46
Flexural Strength (MPa)	137	115	92 ± 2	165	tbd
Flexural Modulus (MPa)	2,913	2,500	1,901 ± 41	3,511	tbd
Compression Strength (MPa)	n/a	104	tbd	n/a	tbd
Compression Modulus (MPa)	n/a	1,930	1,890 ± 32	n/a	tbd

No Ultem 1000 filament for FDM is commercially available.



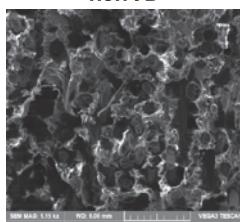
b) FDM-spun thin filaments derived from 204 °C dried thick filaments.

[Kathy C. Chuang, Joseph E. Grady and Robert D. Draper Additive manufacturing and characterization of Ultem polymers and composites/NASA / CAMX Conference Proceedings. Dallas, 2015.]

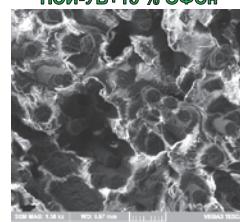
31

## Метод послойного сплавления нити (FDM) – композиты

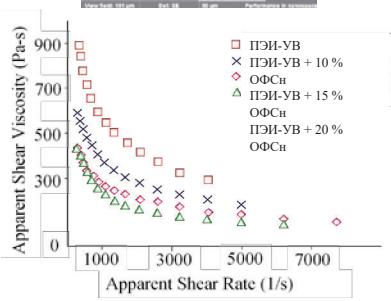
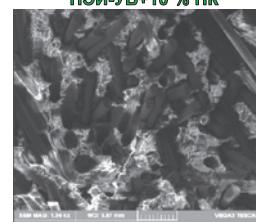
### ПЭИ-УВ



### ПЭИ-УВ+15 % ОФСн



### ПЭИ-УВ+10 % ПК



### Термостойкость композитов ПЭИ/УВ с ОФСн и ПК

Состав	T <sub>2%</sub>	T <sub>5%</sub>	T <sub>10%</sub>
ПЭИ + 30 % УВ	516	529	537
ОФСн			
10 %	500	528	539
15 %	512	530	540
20 %	510	529	539
ПК			
10 %	470	495	510
15 %	474	508	518
20 %	496	510	519

33

## Метод послойного сплавления нити (FDM) – композиты



Свойства напечатанных образцов на основе угленаполненного ПЭИ

Свойства	Nanovia <sup>1</sup> (France)	3DXTech <sup>2</sup> (USA)	ПЭИ-УВ 30% (КБГУ)	
			ПЭИ-УВ-ОФСн	ПЭИ-УВ-ПК
Модуль упругости при изгибе, МПа	4950	7500	13 300	8400
Прочность при изгибе, МПа	-	120	227,6	104,8
Прочность при растяжении, МПа	-	145	94,3	73
Относительное удлинение при разрыве, %	3,5	1,5	2,2	3,4

<sup>1</sup><https://filament2print.com/gb/advanced/893-pei-carbon-fiber.html>

<sup>2</sup>[https://www.3dxtech.com/content/CF\\_Ultem\\_v3.pdf](https://www.3dxtech.com/content/CF_Ultem_v3.pdf)

34

## Суперструктурные материалы для 3D печати, разработанные в КБГУ

### ПОЛНЫЙ ЦИКЛ: СИНТЕЗ, ИЗГОТОВЛЕНИЕ ПОРОШКА, ФИЛАМЕНТА, 3Д ПЕЧАТЬ

✓ ПЭЭК, PEEK – SLS, FDM  
(полизифирэфиркетон)

✓ PEEK CF – FDM  
(ПЭЭК, наполненный углеволокном)

✓ ПФСн-К, PPSU-К – FDM  
(композиты на основе ПФСн)

✓ ПЭИ-К, PEI-К – FDM  
(композиты на основе полизифиримида)

✓ ПФС, PPS – FDM (композиты на основе полифениленсульфida)

✓ Модификатор вязкости для высокотемпературных полимеров и композитов

✓ ПСФ, PSU – FDM  
(полисульфон)

✓ ПЭС, PES – FDM  
(полизифирсультон)

✓ ПФСн, PPSU – FDM  
(полифениленсульфон)

✓ ПФСнФФ, PPSU-С – FDM  
(кардовый полифениленсульфон)

✓ Материалы поддержки для 3D печати высокотемпературных полимеров

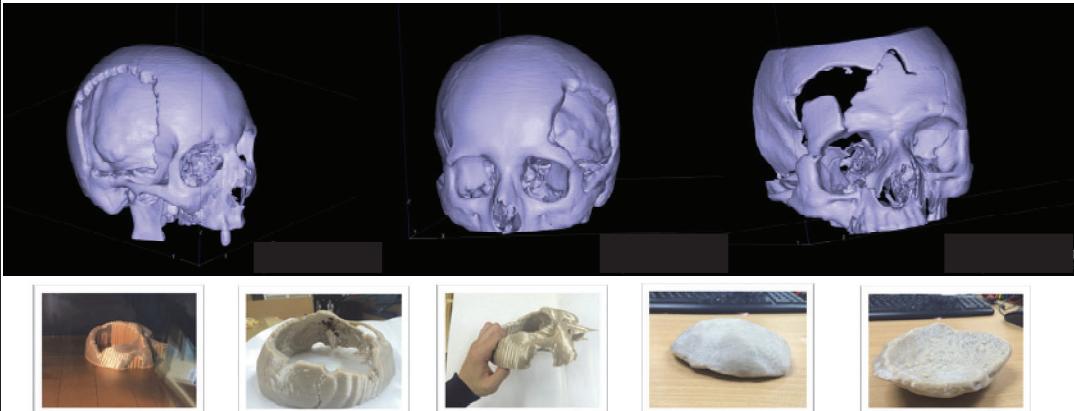
## Метод послойного сплавления нити (FDM) – изделия

Иркут МС-21, 20-30% ПКМ

Толщина стенки от 0,8 до 1,2 мм, снижение веса 70%

36

## Метод послойного сплавления нити (FDM) – возможности



У КАЖДОГО ПАЦИЕНТА ПОВРЕЖДЕНИЯ С УНИКАЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ

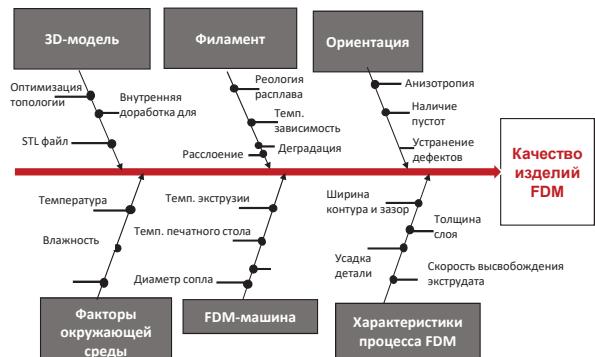
ВОЗМОЖНОСТЬ ТОЧНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОВРЕЖДЕННОЙ ОБЛАСТИ С ПОСЛЕДУЮЩЕЙ 3D-ПЕЧАТЬЮ И ИМПЛАНТАЦИЕЙ

37

## Метод послойного сплавления полимерной нити (FDM) – проблемы и перспективы

### Проблемы

- ✓ Существует проблема нарушения геометрии при печати объемных изделий из кристаллизующихся полимеров.
- ✓ Труднодостижимо получение изделий со 100% заполнением из кристаллизующихся полимеров.
- ✓ Для кристаллических и наполненных полимеров существует проблема низкой межслойевой адгезии.
- ✓ Необходимо развивать исследования в области получения композитов для 3D печати, особенно высоконаполненных.
- ✓ Необходимо развивать исследования в области получения материалов поддержки, особенно для высокотермостойких полимеров и композитов.

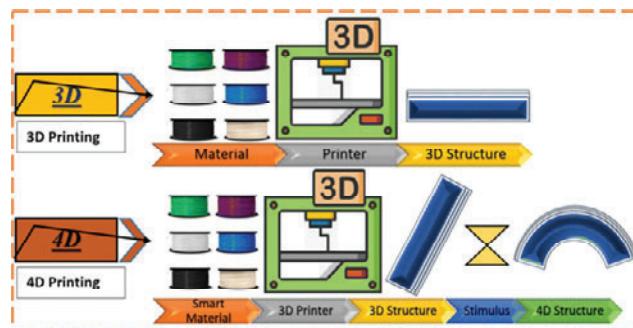


### Перспективы

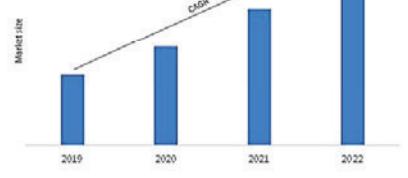
- + Доступность материалов и оборудования
- + Российские производители 3D-принтеров
- + Российские производители филаментов
- + Возможность печати полимерных композиционных материалов
- + Растущая отрасль
- + Возрождение малотоннажной химии в РФ

38

## Развитие аддитивных технологий – 4D печать



Рынок 4D печати с 2019-2022 гг.



39

## Аддитивные технологии - выводы



40

## Предложения

Для обеспечения создания в стране научно-технического задела в области аддитивных технологий с применением полимерных материалов, проведения фундаментальных и прикладных работ по разработке оборудования, материалов и технологий, их внедрения в производство необходимо комплексное решение:

- фундаментальных и поисковых задач, связанных с созданием полимерных материалов нового поколения для аддитивных технологий и прогнозированием их свойств, в рамках грантов РНФ, комплексных научно-технических проектов;
- прикладных задач, связанных с разработкой полимерных материалов и технологий под требования потребителей, а также освоение аддитивных технологий в опытном и серийном производстве в рамках программ развития государственных корпораций и промышленных предприятий, комплексных научно-технических проектов полного инновационного цикла;
- механизмов организации консорциумов разработчиков материалов, оборудования и конструкций для аддитивных технологий в рамках комплексных научно-технических проектов, НТИ, зеркальных инжиниринговых центров и других форм научного и научно-производственного партнерства;
- способа формирования базы данных потребностей отечественных предприятий различной отраслевой принадлежности в оптимизации изделий, в части возможности использования аддитивных технологий;
- проблемы сертификации и стандартизации изделий, технологий и полимерных материалов для аддитивного производства;
- задачи подготовки кадров и повышения квалификации сотрудников, работающих в области аддитивных технологий через межвузовские сетевые программы, объединяющие различные компетенции в области 3D печати;
- механизмов поддержки проектов по разработке отечественного оборудования с отечественным программным обеспечением, в частности, уникального совместного проекта АО Композит Ростсомос и КБГУ, направленного на доработку и масштабирование отечественного оборудования «Эльбрус» для послойного синтеза высокотермостойких полимерных порошков с отечественным программным обеспечением;
- задач по развитию в стране малотоннажного производства отечественных перспективных полимерных материалов нового поколения для аддитивных технологий.

Обратиться в Министерство науки и высшего образования РФ и Российский научный фонд с предложением об объявлении отдельных конкурсов, ориентированных на фундаментальные научные исследования по актуальным междисциплинарным темам в области аддитивных технологий, включая: разработку полимерных материалов нового поколения и технологий аддитивного производства и контроля; создание отечественного оборудования и программного обеспечения для аддитивного производства, в которых преимущественно будут поддержаны проекты, объединяющие малые научные группы, функционирующие в стране, производителей оборудования и будущих потребителей продукции.

41

**Презентация сообщения д.б.н. Гмошинского Ивана Всеволодовича  
«Риски для здоровья человека, связанные с применением аддитивных технологий:  
зарубежный опыт»**



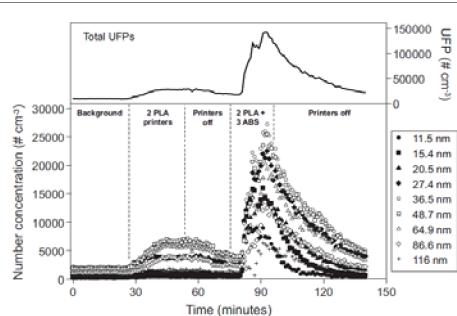
## **РИСКИ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ (АНАЛИЗ ЗАРУБЕЖНОГО ОПЫТА)**

И.В.Гмошинский, В.А.Шипелин

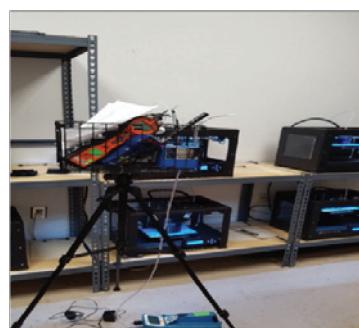
ФГБУН «ФИЦ питания и биотехнологии», Москва

При работе оборудования, использующего аддитивные технологии (3D-принтеров), происходит эмиссия частиц различного размера и состава в воздух рабочей зоны.

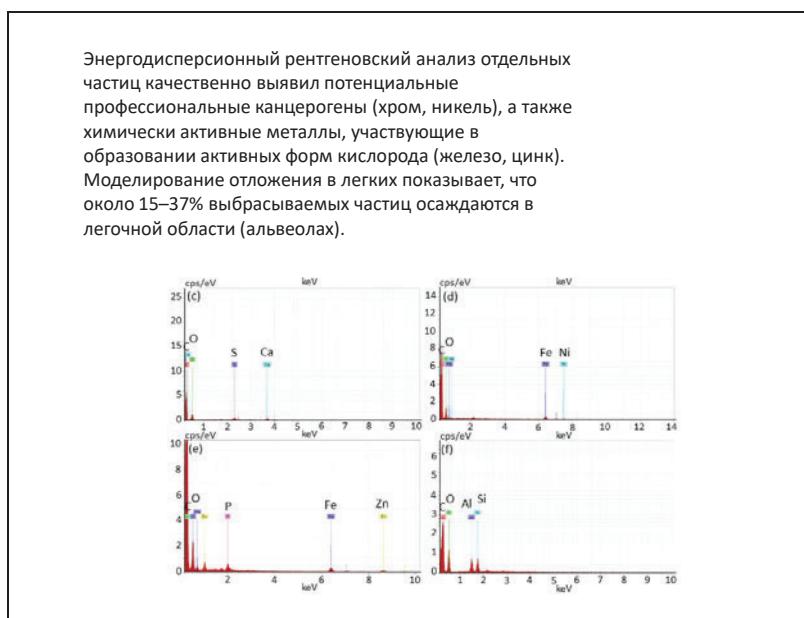
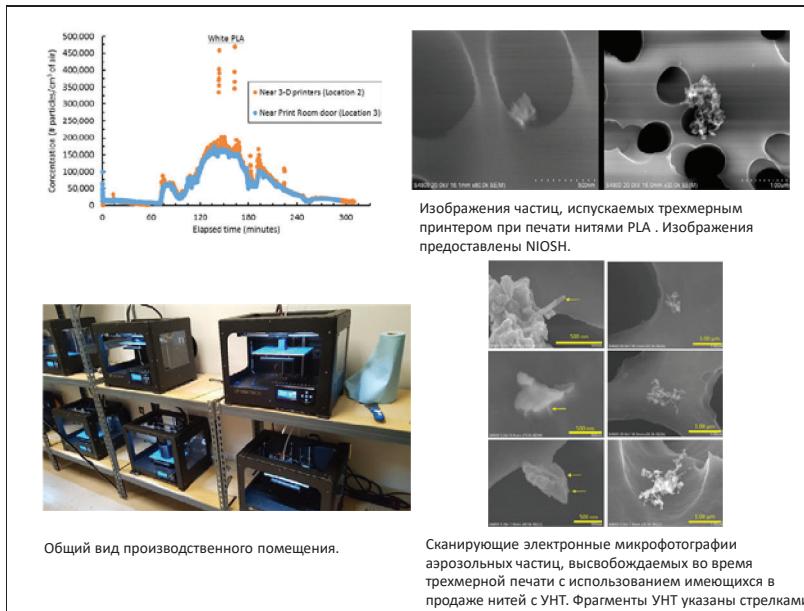
Частицы полимеров и металлов, используемых при 3D печати, потенциально могут быть опасны для здоровья работников предприятия в случае ингаляции.



Кинетика эмиссии аэрозольных наночастиц при печати полимерами двух составов: поли-L-лактат и акрилонитрилбутадиенстирол (АБС).



Отбор проб в помещении с работающими 3D-принтерами



## ПОСТЕР С РЕКОМЕНДАЦИЯМИ US CDC/US NIOSH ПО РИСКАМ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ (ПЕЧАТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ ПОРОШКАМИ)

**3D Printing with Metal Powders: Health and Safety Questions to Ask**

Review the questions on the left and explore different control options and other information to reduce your exposure on the right.

<b>1 Characterization of Potential Hazards</b>  What potential hazards are associated with metal powders? What metals are in the powder? Are there known health effects from the metals present? How does the metal powder react with the air? What is the work environment like (for example, an open or closed system)?	<b>Potential hazards may include:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Breathing and skin contact with metals</li> <li>• Static, fire and explosion</li> <li>• High powered lasers</li> </ul>	<b>Printing considerations:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Printer location</li> <li>• Grounding and bonding straps used when removing filters</li> <li>• Written procedures covering receiving and disposal of metal powders, operation and maintenance activities</li> </ul>	<b>Work environment best practices:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Print in a negatively pressurized area with a dedicated ventilation system, in an area away from other work</li> <li>• Appropriate for suppression system</li> </ul>	
<b>2 Work Activities</b>  Does the work activities cause exposure? What are the metal powders used for? Can changes be made to do the activity to reduce the likelihood of exposure? High potential to have the potential of exposure during printing activities occurring nearby.	<b>Pre-printing</b> Higher potential for exposures: • Loading powder manually into machine • Steaming powder outside of machine Lower potential for exposures: • Enclosed powder loading • Recycling and storing powder	<b>Printing</b> Higher potential for exposures: • Other work activities nearby Lower potential for exposures: • Monitoring printing progress • Printing with metal powders is typically done in an enclosed chamber, and the potential for exposure to emissions is low	<b>Post-printing</b> Higher potential for exposures: • Removing powder or printed object from printer • Moving powder/print object around workspace Lower potential for exposures: • Post-process cleaning/printing object inside containment system • Enclosed powder sieving and powder removal	<b>Maintenance and cleaning</b> Higher potential for exposures: • Performing preventative maintenance on printer • Removing/installing high efficiency particulate air (HEPA) filters Lower potential for exposures: • Cleaning printer equipment and tools • Housekeeping
<b>3 Engineering Controls</b>  Based on the work activity or step in the printing process, what engineering controls will reduce the likelihood of exposure? What are the key design and operational requirements for the controls? Consider fire and explosion hazard of metal powder when selecting controls.	<b>Pre-printing</b> • Containment or local exhaust ventilation directly under handling activities should be HEPA-filtered and fine-regulated if appropriate	<b>Printing</b> • Printing with metal powders is typically done in an enclosed chamber, and the potential for exposure to emissions is low	<b>Post-printing</b> • Controls based for pre-printing • Ventilated storage box or containment • Ventilation for excess dust/cleaning and finishing activities • Ventilated sieving or powder dumping station	<b>Maintenance and cleaning</b> • Local exhaust ventilation when handling powder outside of containment • HEPA-filtered and fine-regulated appropriate waste vacuum • Grounding and bonding of equipment for static control • Sticky mats on floors at printing or powder handling area entrances
<b>4 Administrative Controls</b>  Have you considered your administrative controls? Have you set up a plan for waste management? If you've considered what to do in case of a spill?	• Incorporate metal powder 3D printing into workplace safety programs • Develop standard operating procedures and train workers • Do not consume food or drinks in work areas • Restrict access to essential personnel	<b>Applies to All Printing Stages</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Properly handle filters during replacement, removal and disposal, and check and replace as needed</li> <li>• Use signs to alert workers of hazards and appropriate actions to protect themselves and methods</li> <li>• Consider the reactivity of your base material when selecting cleaning materials, equipment, and methods</li> </ul>	<b>Applies to All Printing Stages</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Clean work areas frequently including between prints and at least daily</li> <li>• Use wet cleaning methods (do not dry sweep or use compressed air)</li> <li>• Remove and dispose of all metal materials (including cleanup equipment/gloves) in compliance with all applicable federal, state, and local regulations</li> </ul>	
<b>5 Personal Protective Equipment (PPE)</b>  If engineering controls do not effectively control the hazard, what PPE can be used? Have you considered other personal safety hazards (such as static, fire, explosion, and heat)?	• Wear PPE that is appropriate for the activities around you (for example, powder change out on the machine next to your work station may require you to wear the same level of PPE). While potential exposures are typically lowest during the printing stage, work surfaces might still be contaminated with metal powders. If printing is interrupted, use the level of PPE needed when the machine begins. Follow proper PPE replacement practice. Do not wear PPE outside of work areas. Options for PPE include: • Nitrile or chemical resistant gloves • Lab coat or coveralls	• Safety glasses, goggles, or face shields • Respiratory protection when indicated and engineering controls cannot control exposures, and in accordance with federal regulations 29 CFR 1910.136	• NIOSH guidance on respirators can be found at <a href="http://www.cdc.gov/niosh/topics/respirators/">www.cdc.gov/niosh/topics/respirators/</a>	

Learn more about safely working with metal powders for 3D Printing | DHSS (NIOSH) Publication No. 2016-114, <https://doi.org/10.26616/NIOSHPUB2016114> | March 2016

## Рекомендации US CDC/NIOSH



Необходимо иметь точный ответ на вопросы:

- Какие металлы представлены в порошке?
  - Известно ли о влиянии металлов на здоровье (см. Паспорта безопасности)
  - Могут ли металлы вступать в реакцию с воздухом?
  - Какая у вас рабочая среда (например, открытое или изолированное место)?
  - Может ли рабочая деятельность вызвать экспонирование порошками?
  - Как вы обращаетесь с металлическими порошками?
  - Какова вероятность потери порошков в окружающую среду?
  - Какова опасность возгорания и взрыва металлического порошка?
  - Можете ли вы изменить технологию, чтобы снизить вероятность загрязнения?
  - Какие другие печатные операции, производятся поблизости?
  - Технические средства контроля?
  - Каковы основные конструктивные и эксплуатационные требования к системе управления?
- Административный контроль: учли ли вы свои методы и политику на рабочем месте?
- Вы разработали план управления отходами?
  - Вы обдумывали, что делать в случае распыления порошка?
  - Какие средства индивидуальной защиты (СИЗ) используются?
  - Предусмотрены ли меры защиты от других вредных факторов производственного процесса (например, статического электричества, огня, взрыва и лазера)?

## «ИСПОЛЬЗОВАНИЕ 3D-ПРИНТЕРОВ В КАЧЕСТВЕ ОРУЖИЯ»

В работе рассматриваются источники рисков, обусловленных возможными вирусными атаками на компьютерные системы, управляющие 3D-принтерами.

Такие атаки могут осуществляться в ходе криптовоенных операций против оборонной промышленности вражеских государств, в ходе террористических актов или в целях недобросовестной коммерческой конкуренции. При этом, путем внедрения в ПО вирусов, искажающих его нормальную работу, могут формироваться конструктивные дефекты в изделиях, используемых в критических отраслях (авиационная и, шире, транспортная техника, вооружения, ракетостроение, атомная промышленность, химические и биотехнологические производства).

Это может привести к широкомасштабным авариям и катастрофам, сравнимым по своим последствиям с ведением «традиционных» военных действий.



Mark Yampolsky<sup>a,\*</sup>, Anthony Skjeljum<sup>b</sup>, Michael Kretzschmar<sup>c</sup>,  
Rud A. Overfelt<sup>c</sup>, Kenneth R. Sloan<sup>c</sup>, Alek Yasinsac<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Department of Computer Science and Software Engineering, University of New Brunswick, Fredericton, NB, Canada E3B 2M5

<sup>b</sup>Department of Computer Science and Software Engineering, Auburn University, 200 University Drive, Auburn, Alabama 36849, USA

<sup>c</sup>Department of Aerospace and Cyber Defense Office, BICES Group Executive, NATO HQ Building 2, Boulevard General de Gaulle, 1110 Brussels, Belgium

\*Corresponding author. Email: myampolsky@unb.ca

Received 10 January 2015; revised 10 March 2015; accepted 21 June 2015; available online 21 June 2016

Keywords: Additive Manufacturing; 3D printing; manipulation; weaponization; Security Takeaway

Article Info

Article history

Received 10 January 2015

Revised 10 March 2015

Accepted 21 June 2015

Available online 21 June 2016

© 2016 Elsevier B.V. All rights reserved.

### ABSTRACT

Additive manufacturing, also known as 3D printing, is a transformative manufacturing

process that will play a major role in the future of manufacturing industries.

However, due to their reliance on computation, 3D printers are susceptible to a broad

range of attacks. This paper presents a conceptual framework for understanding the

use of 3D printers as weapons. The paper identifies a single point for launching subsequent attacks with the printer. For example, an adversary

can compromise a 3D printer in order to manipulate the mechanical properties of

the printed parts. This can lead to a range of effects such as damage to critical systems,

they could endanger human life, disrupt critical infrastructure assets and

produce significant economic and national impacts.

The paper also discusses how “weaponized” compromised additive

manufacturing equipment in order to cause kinetic, mechanical/physical or other

damage to potential targets. The paper presents concepts (parameters) of the elements in an

attack chain and the relationships between them. Finally, the paper discusses the

relationship between the manipulated elements and the resulting effects.

Finally, the weaponization capabilities of 3D printers are discussed.



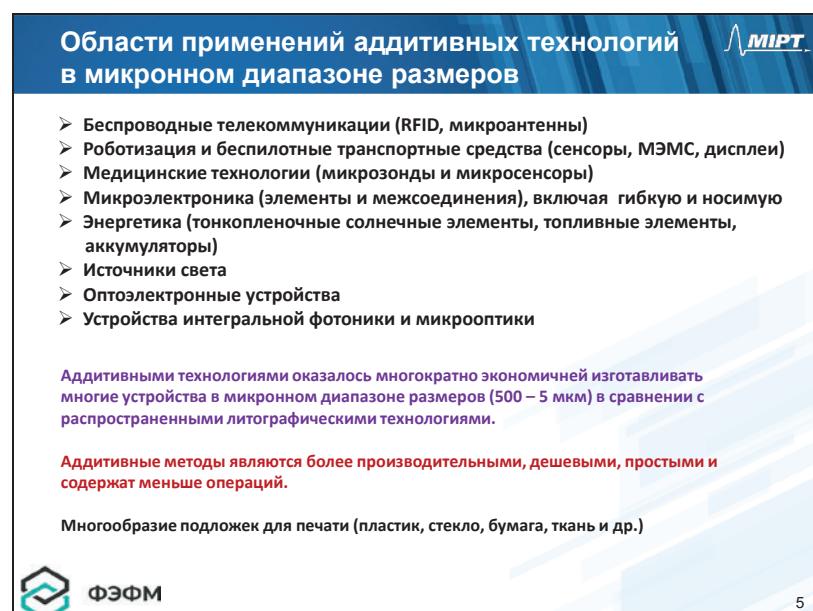
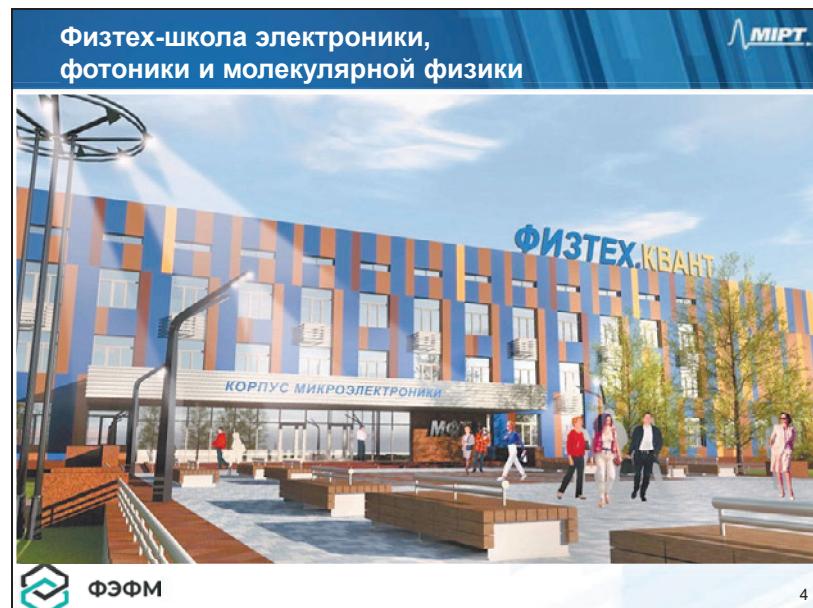
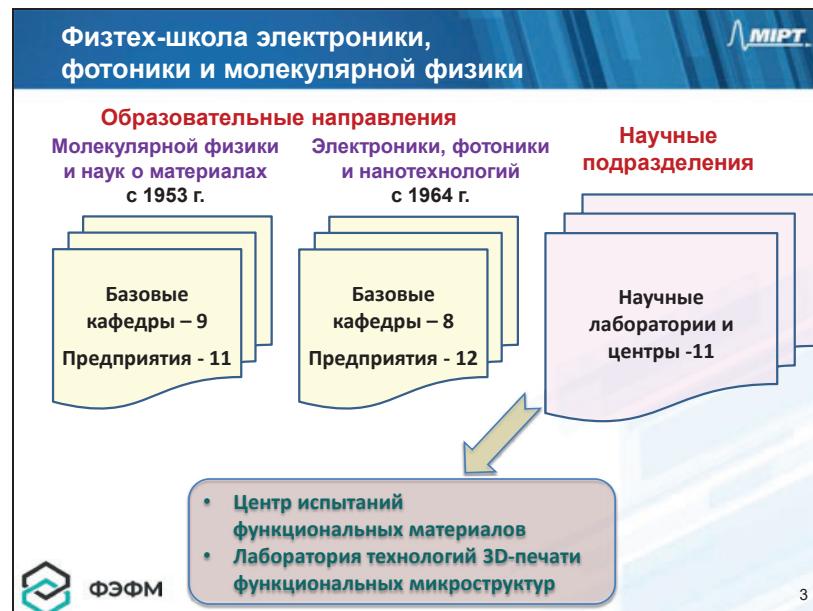
Fig. 2 – Attacks on/with 3D printers.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Необходимо проведение исследований по идентификации и оценке количества частиц (в том числе находящихся в нанодиапазоне размеров), поступающих в воздух рабочей зоны в процессе 3D-печати полимерными и металлическими материалами.
2. Необходимо проведение исследований по оценке рисков для здоровья основных типов аэрозольных частиц, эмиссия которых характерна для использования аддитивных технологий.
3. Необходима разработка комплекса мер по защите здоровья работников производств в области аддитивных технологий от воздействия вредных факторов (ингалируемые частицы металлов и полимеров, пары химических реагентов).
4. Необходима разработка комплекса мер по информационной защите производств, использующих аддитивные технологии, от несанкционированного доступа, преследующего враждебные и/или криминальные цели.

Презентация доклада директора Физтех-школы электроники, фотоники и молекулярной физики Московского физико-технического института (национальный исследовательский университет), член-корр. РАН Иванова Виктора Владимировича, «Аддитивные технологии с проектным масштабом в микронном диапазоне»

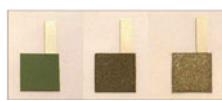




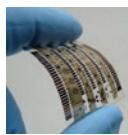
## Примеры изделий аддитивных технологий

MIPT

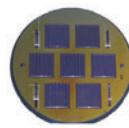
Гибкие аккумуляторы



Органические полевые



Органические солнечные батареи



RFID идентификаторы



OLED

Гибкие дисплеи и идентификаторы

Электролюминесцентные панели



3D-печать межсоединений



Сенсоры и датчики



ФЭФМ

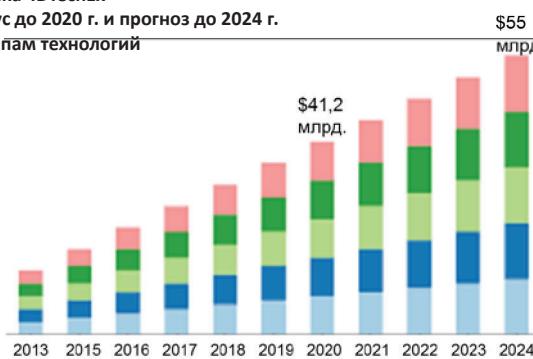
6

## Прогноз развития аддитивных технологий в микронном диапазоне размеров

MIPT

Оценка IDTechEx

Статус до 2020 г. и прогноз до 2024 г.  
по типам технологий



Общий вклад отечественного производства в мировой рынок — менее 1 %.



ФЭФМ

7

## Методы аддитивных технологий в микронном диапазоне размеров

MIPT

**Контактные методы** (форма находится в непосредственном контакте с подложкой) (2D, 30 – 50 мкм)

- Флексография (flexography)
- Трафаретная печать (screen printing)
- Гравиорная печать (gravure printing)
- Мягкая литография (soft lithography)
- Чернильная микроплоттерная (5 мкм)

**Бесконтактные методы** (только осажденный материал вступает в контакт с подложкой)

- Струйная печать (inkjet printing) (2D, 15 – 25 мкм)
- Аэрозольная (чернильная) печать (aerosol printing) (3D, 5 – 10 мкм)
- Аэрозольная «сухая» печать (3D, 10 – 25 мкм)
- Прямое лазерное письмо (laser direct writing) (3D, 0,1 – 0,2 мкм)



ФЭФМ

8

## Развитие аддитивных технологий в МФТИ

MIPT

- Аэрозольная печать чернилами
- Аэрозольная «сухая» печать
- Прямое лазерное письмо

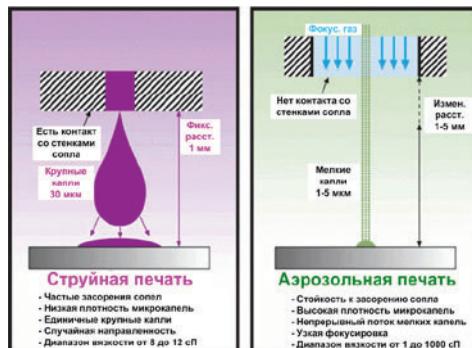


9

### Аэрозольная печать чернилами

MIPT

#### Сравнение струйной и аэрозольной печати



➤ Большее расстояние от сопла до подложки, до 5 мм.

➤ Узкая фокусировка, минимальная ширина линий до 5 мкм.

➤ Аэрозоль не контактирует со стенками сопла.

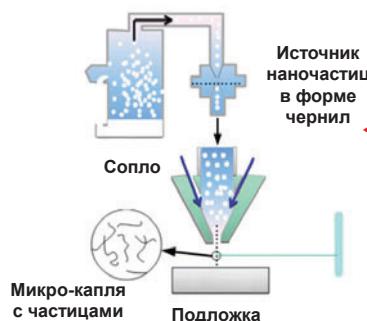


10

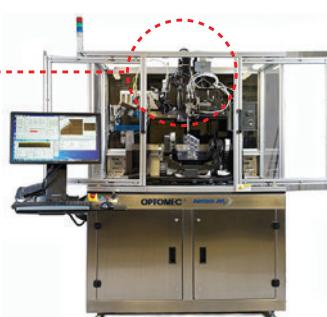
### Аэрозольная печать чернилами

MIPT

Схема процесса аэрозольной печати с источником наночастиц в форме чернил



Оборудование МФТИ  
4-х координатный  
аэрозольный принтер  
ширина линии – 5 -10 мкм



11

## Аэрозольная печать чернилами

MIPT

### Высокопроизводительный принтер 45X G3 Neotech AMT - последняя индустриальная модель

- 5-осевая печать (линейные X / Y / Z + A и B ротационный)
- Виртуальная симуляция пути печати
- Скорость печати: до 1000 мм/с
- Диапазон перемещений: 600 x 500 x 250 мм
- Точность движения: X, Y и Z - оси +/- 5 мкм
- Точность позиционирования: X, Y и Z - оси +/- 2 мкм
- Ширина линии печати: 10 – 2500 мкм
- Минимальная толщина линии: 0,1 мкм
- Массовая скорость печати: до 0,1 – 1 см<sup>3</sup>/мин

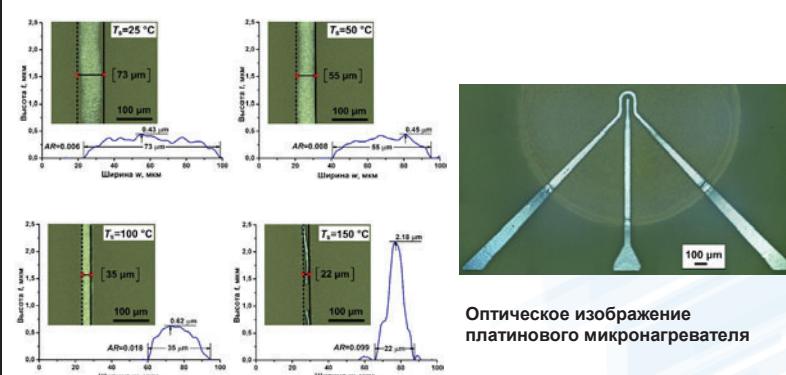


 ФЭФМ

1

## Формирование проводящих микроструктур Pt аэрозольной печатью

MIPT

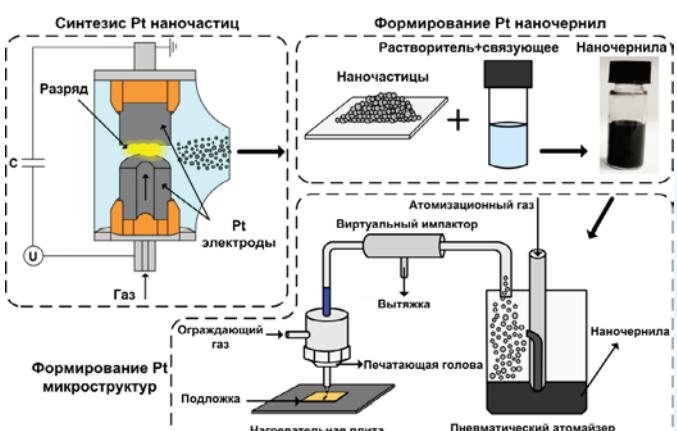


 ФЭФМ

13

## Синтез Pt наночастиц, приготовление чернил и аэрозольная печать Pt наночернилами

MIPT

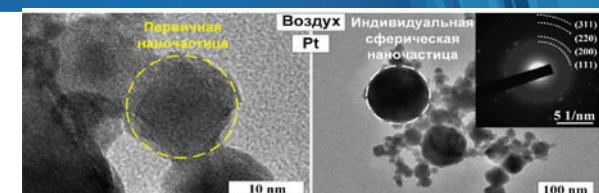


 ФЭФМ

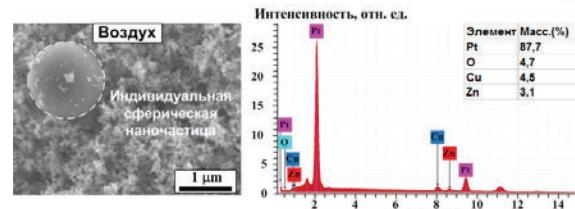
14

## Характеризация синтезированных Pt наночастиц

MIPT.



ПЭМ-изображения агрегатов, первичных и индивидуальных сферических наночастиц Pt, синтезированных на воздухе



РЭМ-изображения и спектры характеристического рентгеновского излучения (EDX-спектры) платиновых наночастиц

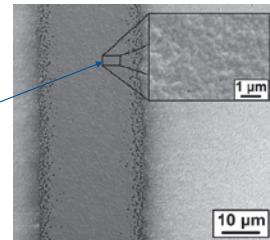
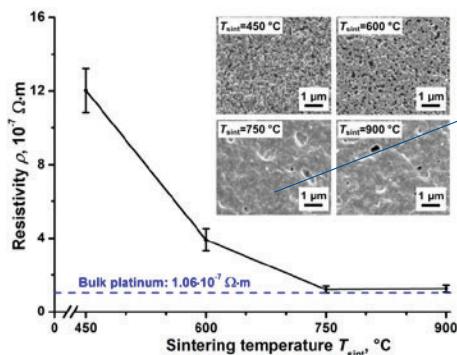


ФЭФМ

15

## Удельное сопротивление Pt микроструктур

MIPT.

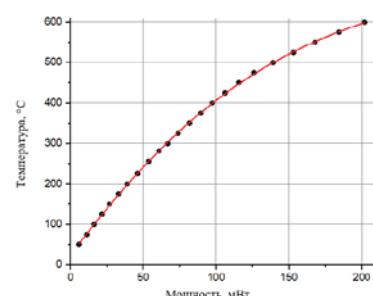
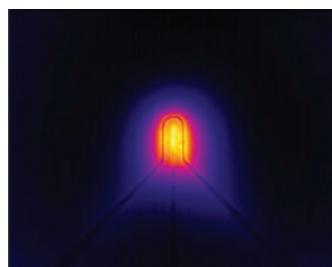


ФЭФМ

16

## Характеристики Pt микронагревателя

MIPT.



ФЭФМ

17

## Формирование функциональных слоев ТОТЭ

MIPT

Слой ТОТЭ	Чернила		Толщина слоя		Плотность мощности		Ссылка
	Размер частиц, нм	Растворитель	мкм	Проходов	Вт/см <sup>2</sup>	Темпера- тура, С	
8YSZ	80	Альфа- терpineол / 2-бутанол	12	4-6	0,24	850	M. Sukeshini A. et al. / Journal of Power Sources 224 (2013)
NiO+8 YSZ	80/100		35	8-12			
8YSZ	80	Альфа- терpineол / 2-бутанол	6,0	10-20	0,46	850	Electrochem. and Solid- State Lett., 12(12), (2009).
8YSZ	20	Этилен- гликоль/П ЭГ/ПВП	3 - 5	10	0,80	800	МФТИ (2020)
GDC	12		0,5-1	1-3			

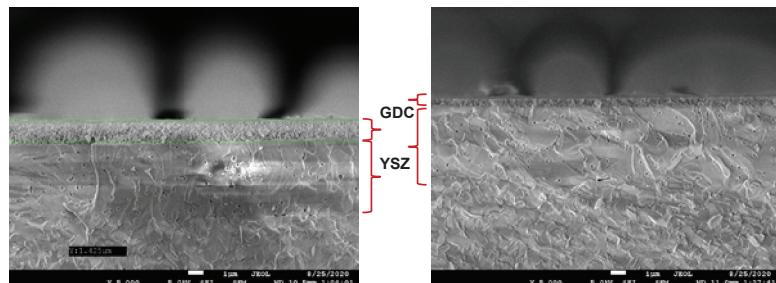


18

## Формирование функциональных слоев ТОТЭ

MIPT

Слои электролитной мембранны YSZ и катодного подслоя GDC, полученные аэрозольной чернильной печатью



Слои YSZ толщиной около 5 мкм и GDC - 0,5 – 1,5 мкм,  
спекание при 1325 °C

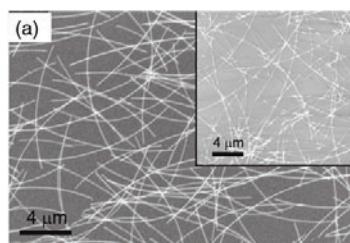


19

## Формирование слоев прозрачного электрода

MIPT

Металлические структуры из нанопроволок серебра продемонстрировали многообещающие свойства и возможность использования в качестве прозрачных электродов для гибких электронно-оптических структур. Для формирования используются чернила из Ag нанопроволок с типичным диаметром от 20 до 40 нм и длиной > 20 мкм, диспергированные в растворителе.



SEM изображение Ag нанопроволок



20

## Развитие аддитивных технологий в МФТИ

MIPT

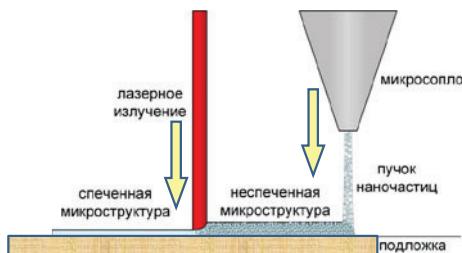
- Аэрозольная печать чернилами
- Аэрозольная «сухая» печать
- Прямое лазерное письмо



2  
4

### Принципиальная схема аэрозольной печати с локальным лазерным спеканием

MIPT



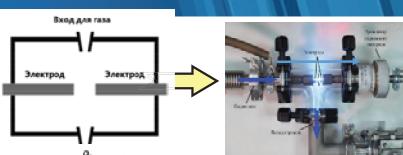
Совмещение скоростей двух процессов: доставки на подложку наночастиц через фокусирующее сопло и лазерного спекания наночастиц на подложке.

### Процессы сухой аэрозольной печати наночастицами

MIPT

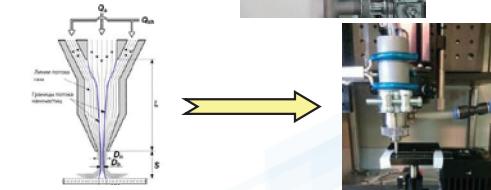
1) Синтез наночастиц в импульсном газовом разряде

+

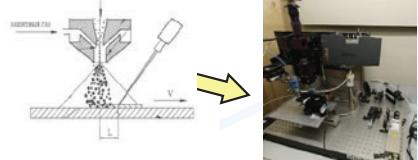


2) Осаджение наночастиц на подложку через фокусирующее микросопло

+



3) Локальное спекание наночастиц лазерным излучением



23

## Модуль лазерного спекания

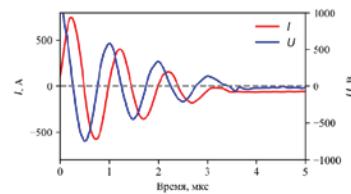
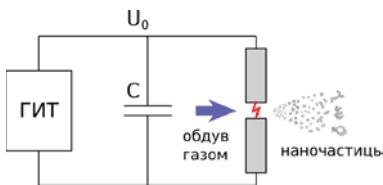
MIPT



24

## Модуль синтеза наночастиц в импульсно-периодическом газовом разряде (ИГР)

MIPT



- Включение газового разряда самопроизвольным межэлектродным промежутком
- Малые размеры межэлектродного промежутка, 0,5 - 3,0 мм
- Колебательно-затухающая форма импульса разряда конденсатора на низкоимпедансную нагрузку (разрядный промежуток)
- Ток импульсного разряда – 10 - 5 000 А
- Продувание газом разрядного промежутка – 1 - 100 м/с
- Частота следования разрядных импульсов – до 600 Гц
- Размер синтезируемых наночастиц – 1 - 20 нм
- Энергия одного разрядного импульса – 2 - 1000 мДж
- Масса наночастиц, синтезируемых за один разрядный импульс –  $10^{-8}$  -  $10^{-7}$  г
- Массовая производительность – до 500 мг/час



ФЭФМ

2

## Историческая справка о методе ИГР

MIPT

- Метод синтеза наночастиц ИГР начал развиваться с конца 80-х годов. (H. Burtscher and A. Schmidt-Ott, Phys. Rev. Lett. 48 (1984)). (Aerosol Sci. 19 (1988)). Метод основан на электрической эрозии материала электродов. Генераторы получения разряда, имели ограниченную частоту 600 Гц.
- Повышение массовой производительности при увеличении частоты до 25 кГц за счет использования высоковольтного полупроводникового переключателя (1,7 кВ) реализовано в 2011. Из-за ограничений по напряжению и току таких переключателей этот метод ограничен по мощности. (A. Schmidt-Ott, T.V. Pfeiffer, WO/2013/115644, 2013; V.A. Vons, A. Schmidt-Ott et all. J. Nanopart. Res. 13 (2011))
- Повышение массовой производительности за счет использования множества пар электродов, последовательно включенных в разрядную цепь генератора импульсных токов (2013). (Efimov, A.A., Ivanov, V.V., et all. (2013) Technical Physics Letters, 39 (12)). Предложен способ получения аэрозольных наночастиц в импульсно-периодическом многозazorном газоразрядном генераторе с 12 межэлектродными промежутками и частотой следования разрядных импульсов 2,5 кГц. (2015). (Ivanov, V.V., Efimov, A.A., et all. (2016) Technical Physics Letters, 42 (8))



ФЭФМ

2

## Сравнение ИГР с другими газофазными методами

MIPT

Метод	ИГР	ЭВП	Лазерное испарение
Размеры первичных наночастиц, нм	1-20	20-300	10-30
Материалы испаряемые (мишени)	Металлы, Сплавы, Полупроводники	Металлы, Сплавы	Керамика, непрозрачная для излучения лазера
Форма мишени	Стержни (прутки)	Проволока	Порошковая заготовка
Энергозатраты удельные, кВт*ч/кг	2000	5-50	80-300
Производительность, г/ч	~ 1-10	50-800	10- 80

ФЭФМ

2  
7

## Повышение производительности за счет увеличения числа последовательно соединенных промежутков

MIPT

Путь увеличения числа последовательных промежутков и частоты следования импульсов - МФТИ (Ivanov, V.V., Efimov, A.A., et all, (2016) Technical Physics Letters, 42 (8))

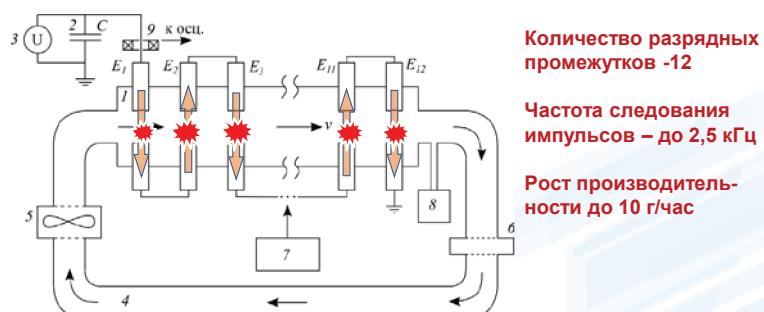


Схема импульсно-периодического газоразрядного генератора: E<sub>1</sub>-E<sub>12</sub> – пары разрядных электродов, 1 – разрядная камера, 2 – емкостной накопитель энергии, 3 – зарядное устройство, 4 – транспортный газопровод, 5 – газовый компрессор, 6 – фильтр сбора наночастиц, 7 – блок управления, 8 – анализатор аэрозолей, 9 – датчик импульсного тока

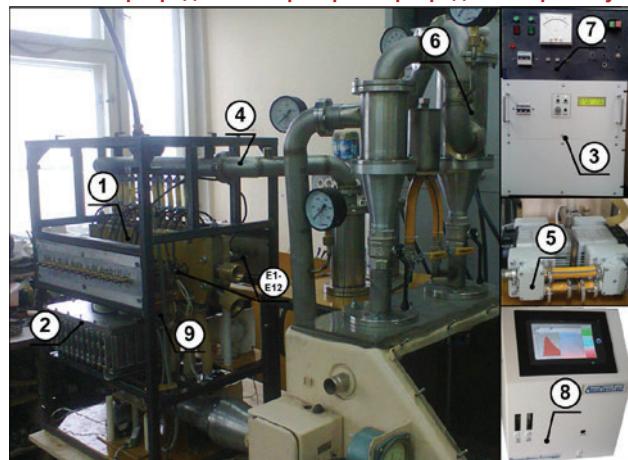
ФЭФМ

28

## Производительный ИГР генератор в МФТИ

MIPT

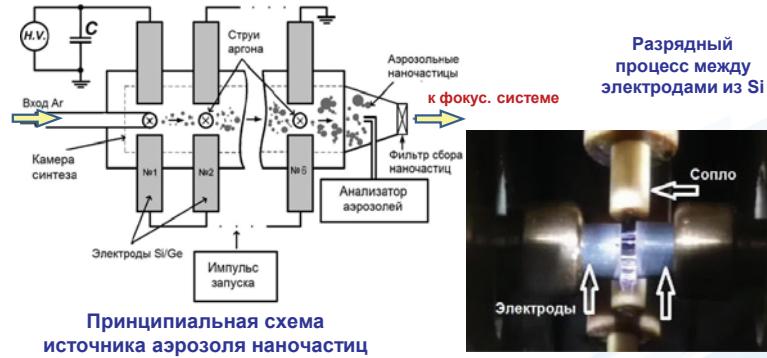
Импульсный газоразрядный генератор с 12 разрядными промежутками



ФЭФМ

29

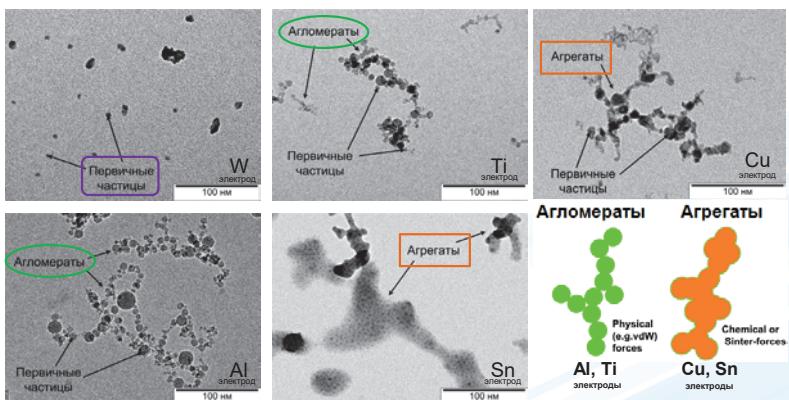
## Работа ИГР генератора для получения наночастиц Si



30

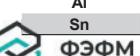
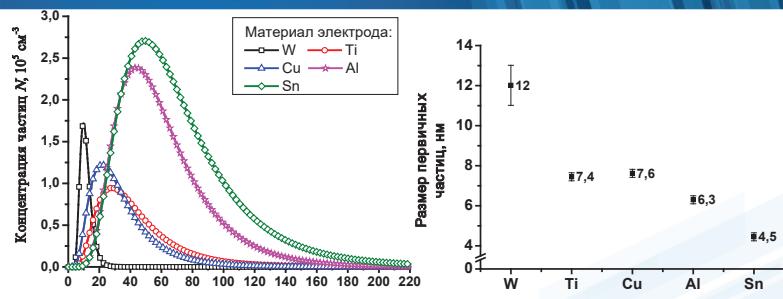
## Характеристика аэрозольных наночастиц в ИГР

### Морфология наночастиц в составе аэрозоля на выходе из ИГР генератора в зависимости от материала электродов

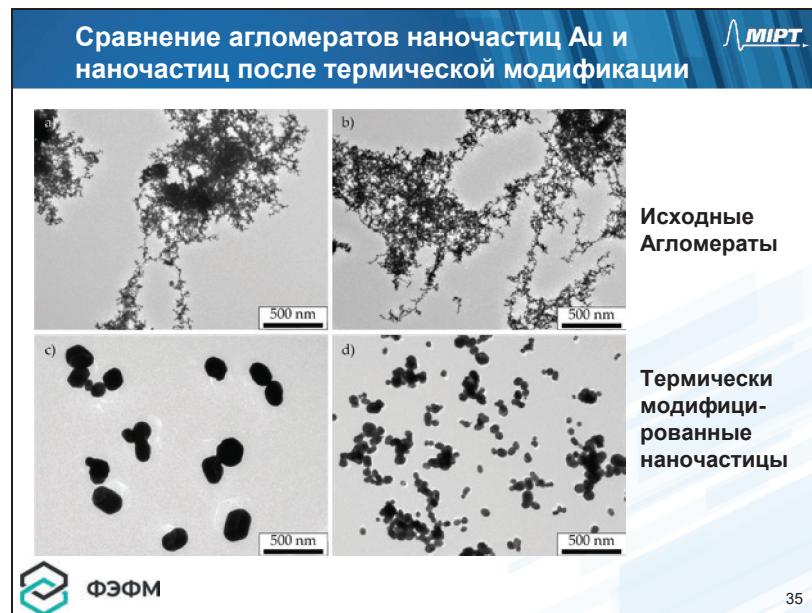
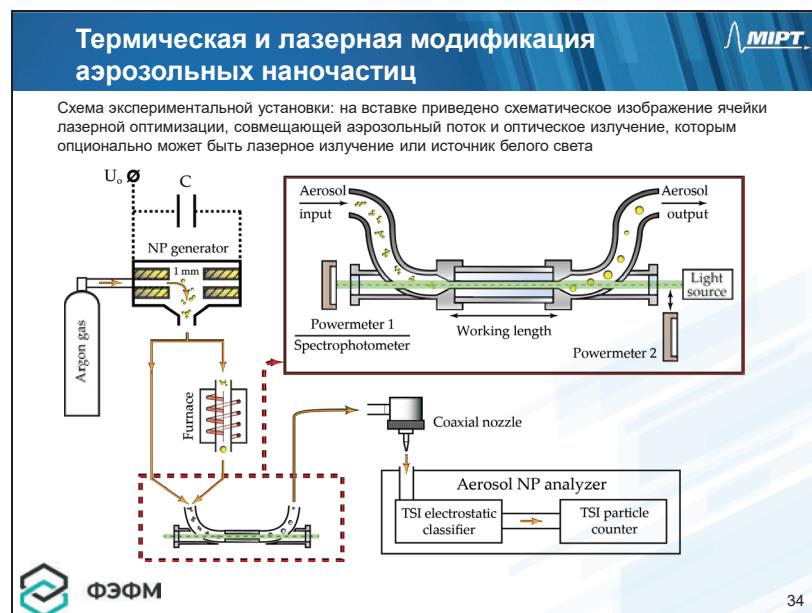


31

## Характеристика аэрозольных наночастиц в ИГР

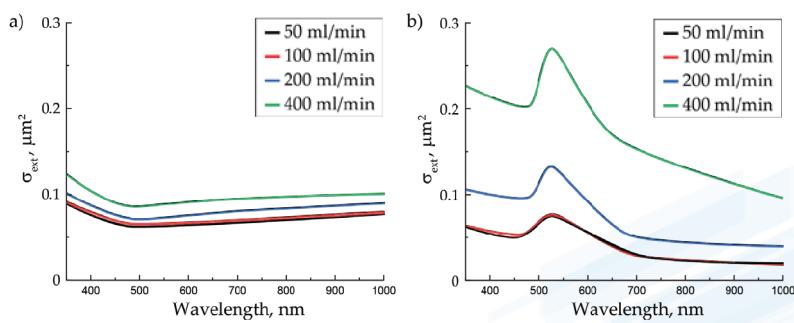


32



## Оптические спектры агломератов наночастиц Au и наночастиц после термической модификации

MIPT



Спектры сечения экстинкции одной наночастицы, усредненные по потоку исходных агломератов золотых наночастиц (а) и термически модифицированных сферических наночастиц (б), полученных при разных расходах газа.

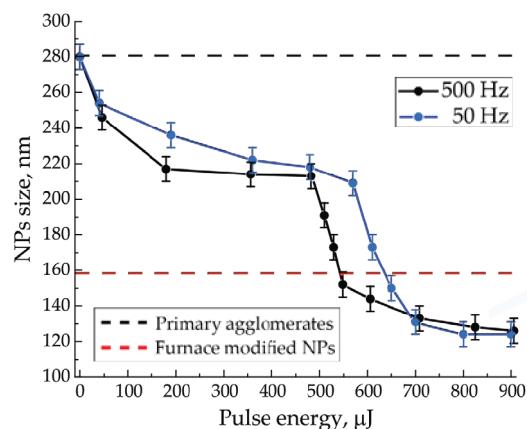


ФЭФМ

36

## Усадка размеров агломератов наночастиц Au при обработке импульсным лазером

MIPT



Зависимость размера наночастиц на выходе из ячейки лазерной модификации от энергии импульса лазерного излучения с длиной волны 1053 нм при частотах следования импульса 50 и 500 Гц и расходе аэрозоля 50 мл/мин.

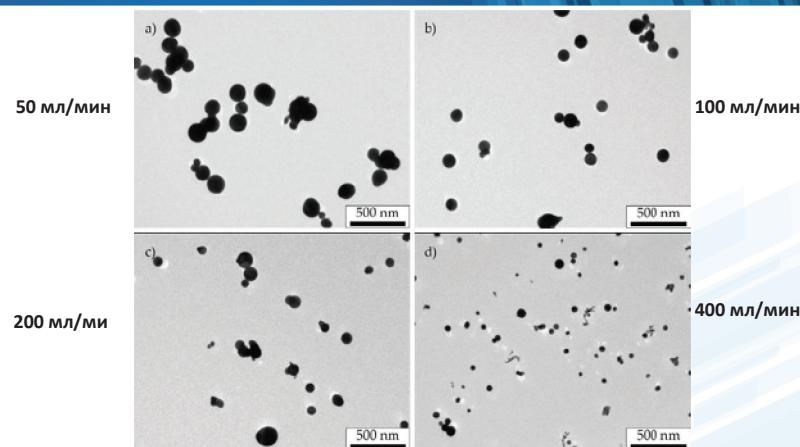


ФЭФМ

37

## Наночастицы Au после лазерной модификации

MIPT



ПЭМ золотых наночастиц, модифицированных лазерным излучением с длиной волны 1053 нм и частотой следования импульсов 500 Гц при энергии импульса 900 мкДж

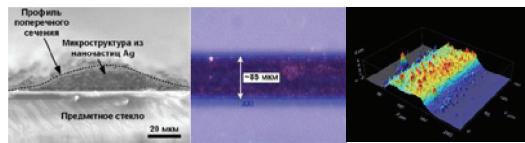


ФЭФМ

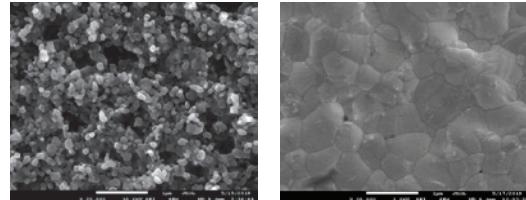
38

## Сухая аэрозольная печать Ag наночастицами

MIPT



Изображения формируемых микроструктур с растрового и оптического микроскопов и 3D профилометра



Изображения поверхности исследуемых образцов с растрового микроскопа: неспеченная (слева) и спеченная (справа) поверхности из наночастиц серебра

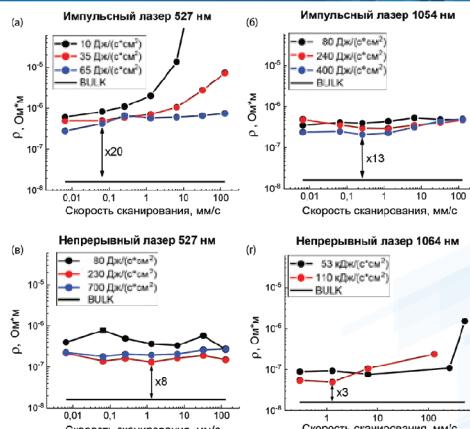
ФЭФМ

39

39

## Лазерное спекание осажденных Ag наночастиц

MIPT



Зависимости удельного сопротивления спеченной структуры от скорости сканирования лазерным пучком

## Развитие аддитивных технологий в МФТИ

MIPT

- Аэрозольная печать чернилами
- Аэрозольная «сухая» печать
- Прямое лазерное письмо

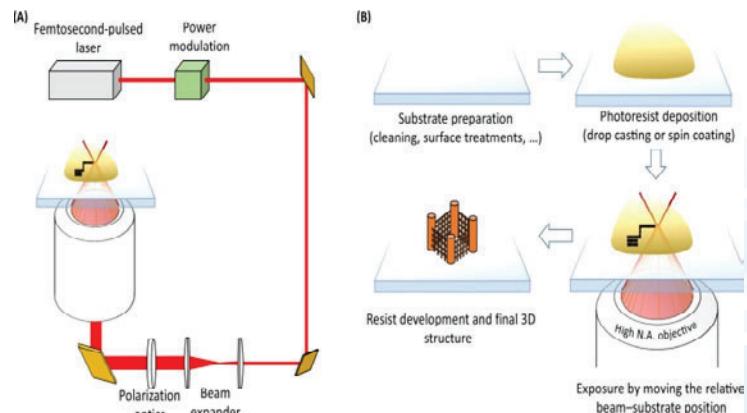
ФЭФМ

4

## Прямое лазерное письмо (DLW)

MIPT

### Метод фотополимеризации



ФЭФМ

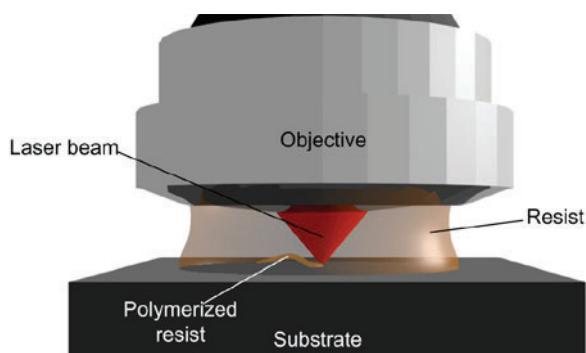
4

2

## Прямое лазерное письмо (DLW)

MIPT

### Метод фотополимеризации



ФЭФМ

43

## Прямое лазерное письмо (DLW) в МФТИ

MIPT



Nanoscribe Photonic Professional с фемтосекундным лазером 780 нм



ФЭФМ

44

## Применения DLW Фотонные интегральные схемы

MIPT

- Многофункциональные оптические системы, состоящие из большого числа компонент, связанных между собой оптически, расположенных на единой подложке и вместе исполняющих разного вида функции обработки и передачи оптических сигналов.

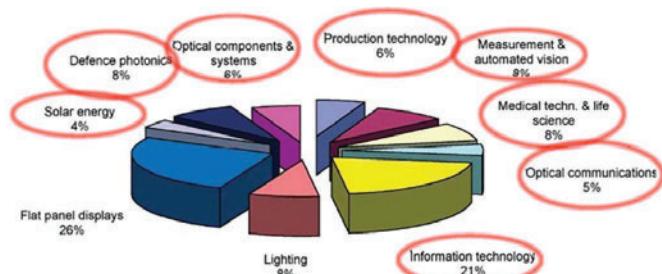


45

## Применения DLW Фотонные интегральные схемы

MIPT

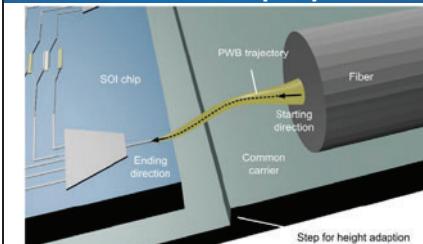
### Рынок фотонных структур



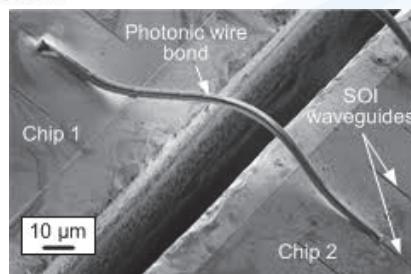
46

## Применения DLW: Фотонные микропровода

MIPT



R D Zvagelsky, D A Chubich, A G Vitukhnovsky/ J.Phys.D: Appl.Phys, (2020) 53 355192



10 μm

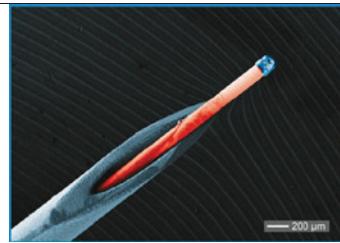
Chip 2



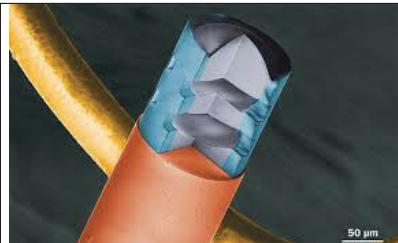
47

## Применения DLW: линзы на световодах

MIPT



Микролинза на оптоволокне для эндоскопии  
(Nanoscribe)



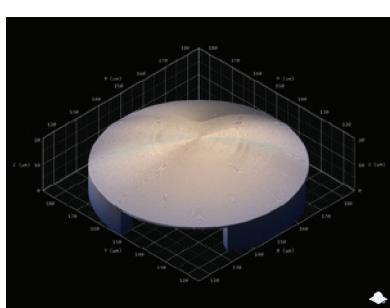
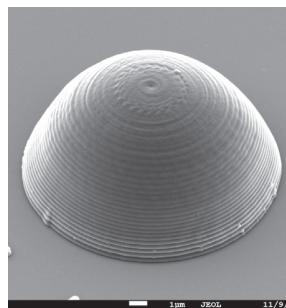
Микрообъектив (Nanoscribe)

ФЭФМ

48

## Применения DLW: линзы на световодах

MIPT



Optik - International Journal for Light and Electron Optics 301 (2019) 163956  
Contents lists available at ScienceDirect  
Optik journal homepage: www.elsevier.com/locate/opto

ФЭФМ

49

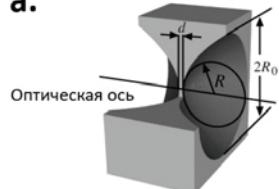
## Применения DLW: рентгеновские линзы

MIPT

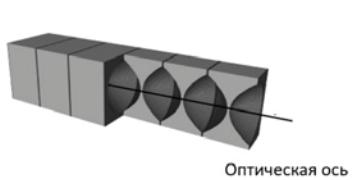
а) Изображение одиночной преломляющей линзы.

б) Изображение составной преломляющей  
рентгеновской линзы.

а.



б.



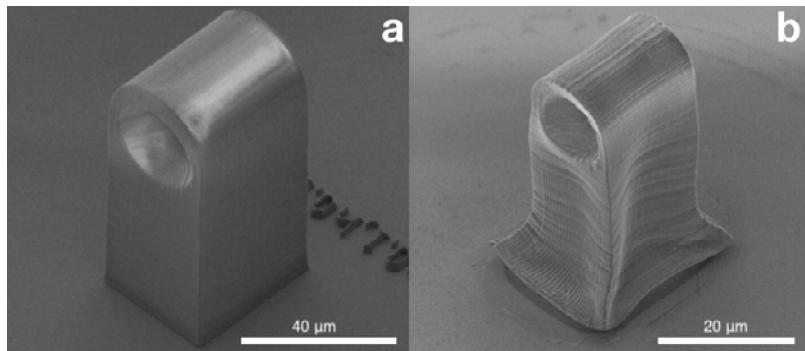
ФЭФМ

50

## Применения DLW: рентгеновские линзы

MIPT.

СЭМ изображения рентгеновских линз



IP-Dip линзы. а – до пиролиза, б – после пиролиза при 450 С.

M.I. SHARIPOVA , ... D. CHUBICH, D.A.KOLYMAGIN, A.G. VITUKHNOVSKY et al // Optical materials express, 2021



ФЭФМ

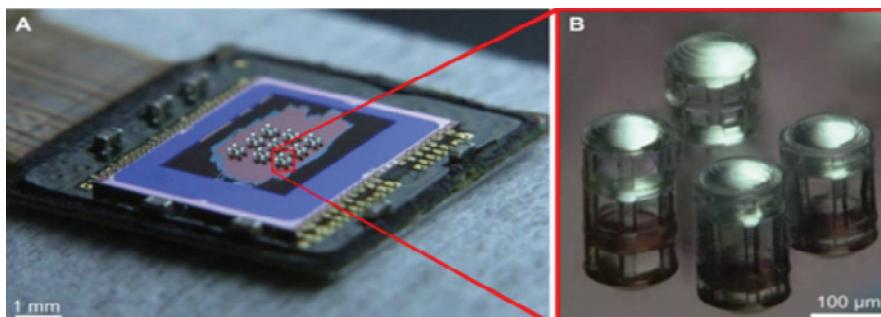
51

## Применения DLW: технология «Eagle Eye»

MIPT.

Миниатюрные мультиапертурные системы визуализации:

- эндоскопия
- оптическое зрение дронов
- оптическая метрология,
- систем безопасности и прочее.



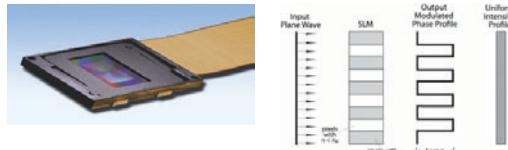
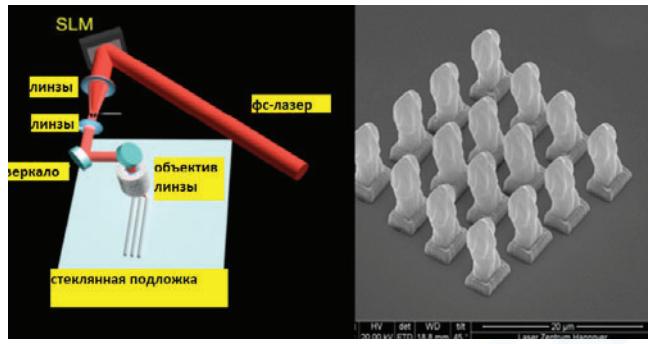
ФЭФМ

52

## Расширение DLW для серийного производства



### Многолучевая схема двухфотонной полимеризации



ФЭФМ

SLM - пространственный световой модулятор PLUTO-2.1  
LCOS (МФТИ)

53

## Резюме по перспективам DLW

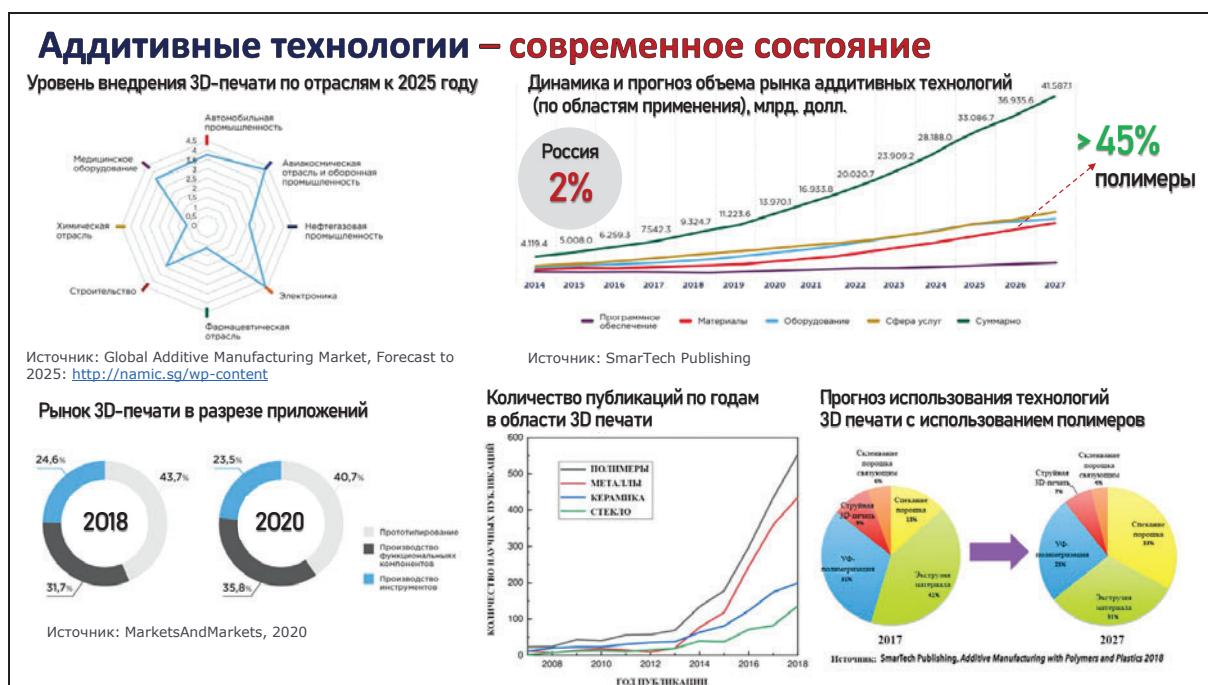


- Использование DLW-литографии целесообразно
- Выход из планарной геометрии для фотонных интегральных схем (PIC) возможен
- Расширение DLW до DLW-STED дает разрешение менее 50нм без электронной литографии
- Применения для создания пластиковых линз для: от «рентгена» до ИК-диапазона
- «Mass production» с DLW – возможно



ФЭФМ

Презентация доклада и.о. проректора по научно-исследовательской работе  
Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова  
д.х.н., профессора Хашировой Светланы Юрьевны о проекте  
«Развитие отрасли аддитивных полимерных технологий в Российской Федерации  
на основе инновационных отечественных научных разработок»  
комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла  
«Аддитивные технологии. Новые материалы и технологические процессы»



## Полимерные материалы в аддитивных технологиях

### АДДИТИВНАЯ ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИМЕРОВ



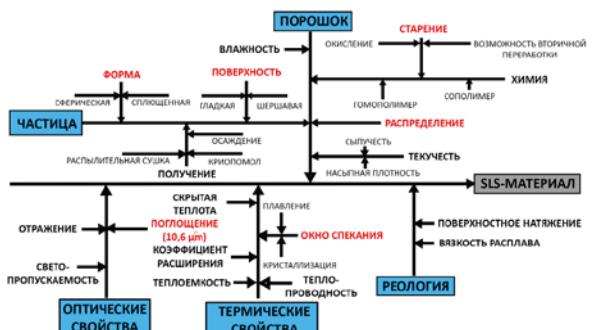
### Метод селективного лазерного спекания – проблемы и перспективы

#### Проблемы

Высокая стоимость материалов и оборудования.  
Полиамид 12 (PA 12) – основной и почти единственный вариант  
Полимерные порошки для 3D в стране не производятся.  
Оборудование для спекания перспективных высокотемпературных порошков недоступно.  
Необходимо развивать исследования в области получения порошков нужной структуры, размера, сферичности и сыпучести.  
Существует проблема пористости и высокой шероховатости изделий.  
Высокий расход материала. Первый слой необходимо формировать из подобного материала для снижения термических эффектов.  
Каждый последующий эксперимент требует чистки всей камеры.  
Для предотвращения окислительных эффектов необходимо использовать инертную среду.

#### Перспективы

- + Возможность моделировать сложнейшую геометрию (как внутренних элементов, так и целого изделия).
- + Для построения сложных деталей не используется материал поддержки, исключается риск повреждения напечатанной детали.
- + Высокая точность печати
- + Растущая отрасль
- + Возрождение малотоннажной химии в РФ



Комплекс свойств перспективного SLS-материала

Для развития технологии SLS необходимо расширение ассортимента полимерных порошков и разработка оборудования

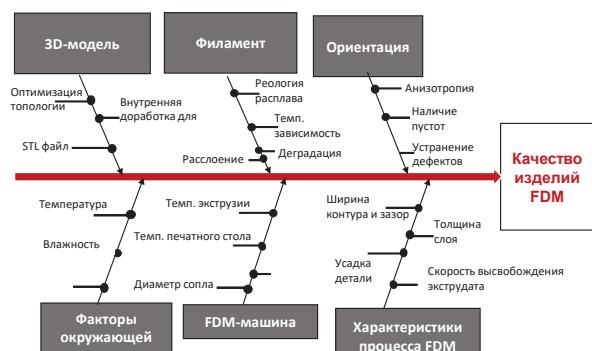
### Метод послойного сплавления полимерной нити (FDM) – проблемы и перспективы

#### Проблемы

- ✓ Существует проблема нарушения геометрии при печати объемных изделий из кристаллизующихся полимеров.
- ✓ Труднодостижимо получение изделий со 100% заполнением из кристаллизующихся полимеров.
- ✓ Для кристаллических и наполненных полимеров существует проблема низкой межслойевой адгезии.
- ✓ Необходимо развивать исследования в области получения композитов для 3D печати, особенно высоконаполненных.
- ✓ Необходимо развивать исследования в области получения материалов поддержки, особенно для высокотемпературных полимеров и композитов.

#### Перспективы

- + Доступность материалов и оборудования
- + Российские производители 3D-принтеров
- + Российские производители филаментов
- + Возможность печати полимерных композиционных материалов
- + Растущая отрасль
- + Возрождение малотоннажной химии в РФ



## Метод стереолитографии – проблемы и перспективы



## Полимерные материалы в аддитивных технологиях: проблемы и перспективы внедрения в РФ



## Аддитивные полимерные технологии – развитие в РФ

**Ключевая цель** - повышение эффективности использования аддитивных полимерных технологий в промышленном комплексе Российской Федерации на основе инновационных отечественных научных разработок и переход к передовым цифровым технологиям в стратегических направлениях отечественной промышленности для производства конкурентных образцов техники

### Задачи

- ✓ Создание отечественных полимерных материалов и композитов для аддитивных технологий
- ✓ Разработка отечественного оборудования с отечественным программным обеспечением для аддитивных технологий, моделирование свойств изделий и определение оптимальных режимов печати

### 15 проектов - 12 организаций

КБГУ, СПбПУ, ЯГТУ, РТУ МИРЭА, ВолГТУ, ИПХФ РАН, ИВС РАН, ИНХС РАН, БИП СО РАН, ВИАМ АО «Композит», ООО «ВОЛТЕХНО»



## Аддитивные технологии – метод селективного лазерного спекания



ПОСЛОЙНОЕ СПЕКАНИЕ ПОЛИМЕРНОГО ПОРОШКА  
С ПОМОЩЬЮ CO<sub>2</sub>-ЛАЗЕРА ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ИЗДЕЛИЯ

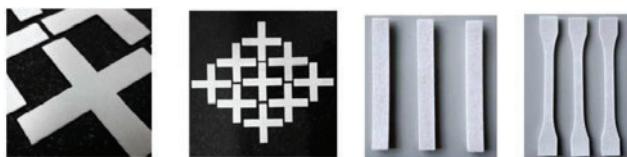
### Разработка технологии получения отечественных полимерных порошков на основе конструкционных полимеров ПА-12 и поликарбоната для 3D печати

Исполнитель: ВИАМ

На базе ФГУП «ВИАМ» проводятся исследования по созданию технологий переработки термопластичных композиций на основе полиамида ПА-12 и поликарбоната методами SLS и FDM 3D-печати.

#### Сравнительный анализ свойств порошковой композиции на основе полимида ПА12-Л с аналогами

Свойства	Значения свойств для полимерных композиций марок			
	ПА-12Л (Россия)	PA 2200 (EOS, Германия) [20]	PA12 AdSint (Advance3D materials GmbH, Германия) [21]	FG3200PA (Human Garsoon High-tech Co. Ltd, Китай) [22]
Температура плавления $T_{\text{пп}}$ , °C	184	184	182	183
Температура кристаллизации $T_{\text{кп}}$ , °C	160	153	152	154
$T_{\text{пп}} - T_{\text{кп}}$ , °C	24	31	30	29
Средний диаметр частиц, мкм	65,3	56	38	45
Насыщая плотность, кг/м <sup>3</sup>	0,41	0,43	0,50	0,45



ТРУДЫ ВИАМ №9 (57) 2017

УДК 678.073

А.Е. Сорокин<sup>1</sup>, М.М. Платонов<sup>2</sup>, С.А. Ларинов<sup>3</sup>

#### СЕЛЕКТИВНОЕ ЛАЗЕРНОЕ СПЛАВЛЕНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИАМИДА 12

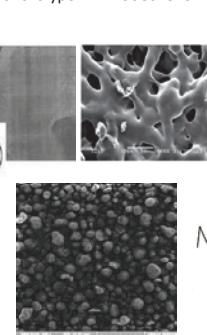
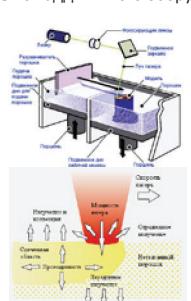
DOI: 10.18577/2307-6046-2017-0-9-5-5

### Разработка полимерных порошков на основе полиэфиркетонов для 3D печати и получение фундаментальных научных знаний о процессах их послойного лазерного спекания

Исполнители: КБГУ, АО Композит

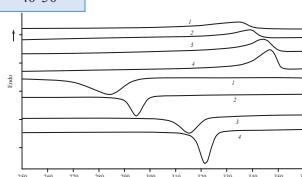
**Цель:** – разработка полимерных порошков на основе полиэфиркетонов для послойного лазерного спекания ответственных изделий повышенной сложности, с учетом особенностей их синтеза и исследование физико-химических процессов сплавления частиц;

– исследование физико-химических процессов сплавления частиц и доработка опытного образца 3D принтера для вывода на рынок аддитивного оборудования мирового уровня и обеспечения технологической независимости и импортозамещения



#### Свойства порошка для 3D печати

Свойство	ПЭЭК
$\rho$ насып., г/см <sup>3</sup>	0,3-0,4
D сред, мкм	40-50



Фазовые переходы ПЭЭК-КБГУ в зависимости от молекулярной массы

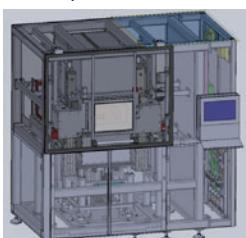
Воздействие лазерного луча на материал

Микрофотография ПЭЭК-КБГУ

IP 60-порошок (нежелательные)

**Разработка первого опытно-промышленного образца SLS принтера для высокотермостойких полимерных порошков на основе установки послойного лазерного сплавления «ЭЛЬБРУС»**

**Исполнители:** КБГУ, АО Композит

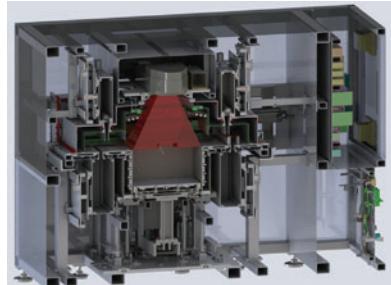


**Преимущества:** позволяет уменьшать зону спекания для изготовления лабораторных образцов, подходит для проведения исследований процесса и материалов

Максимальная мощность лазера, Вт	80
Диаметр лазерного пятна, мкм	150
Толщина слоя, мкм	10 .. 200
Размер рабочей зоны, мм	500 x 500 x 300
Наибольшая масса детали, кг	200

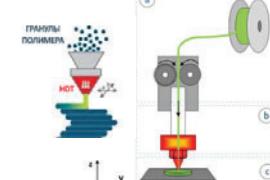


Ближайший аналог: Electro Optical Systems P800 (Германия)- минимальная загрузка 10 кг



**Порошковые материалы:**  
Порошки на основе полизифиретонов, композитов и нанокомпозитов на основе полизифиретонов.

**Аддитивные технологии – метод послойного сплавления нити (FDM)**



**ПОСЛОЙНОЕ НАНЕСЕНИЕ РАСПЛАВЛЕННОЙ ПОЛИМЕРНОЙ НИТИ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ИЗДЕЛИЯ**

13

**Разработка высокотехнологичных полимерных и композиционных материалов на основе кристаллизуемых полизифиримидов для их переработки методами 3D печати**

**Исполнитель:** ИВС РАН

**Цель:** создание новых высокопрочных композиционных материалов на основе кристаллизуемых полизифиримидов для переработки методом 3Д-печати.

**Задачи**

- Синтез отечественных ароматических кристаллизуемых полизифиримидов подходящих для 3Д-печати;
- Получение изделий методом FDM-печати из кристаллизуемых полизифиримидах и исследование их свойств
- Разработка композитов на основе синтезированных кристаллизуемых полизифиримидов
- Исследование структуры, термических, термомеханических свойств изделий полученных методом FDM-печати из композитных филаментов на основе кристаллизуемых полизифиримидов
- Изучение деформационно-прочностных и усталостных свойств изделий полученных методом FDM-печати в широком интервале температур

**Применение**

Аэрокосмическая промышленность, Авиация, Машиностроение, Химическая и нефтяная промышленность, Медицина

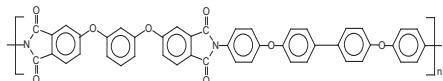


**Исполнитель: ИВС РАН**

Р-ОДФО частично-кристаллический полиимид синтезируемый в ИВС РАН

Р-ОДФО,  $T_c = 205^\circ\text{C}$ ,  $T_{\text{пп}} = 320^\circ\text{C}$  (разработка ИВС РАН)

Образец	Прочность, МПа	Модуль, МПа	Деформация, %
<b>Литье под давлением</b>			
Р-ОДФО	100	2600	70
<b>FDM-печать</b>			
Р-ОДФО	80	2400	11



Экспериментальная установка для FDM-печати

- Температура столика до  $200^\circ\text{C}$
- Температура экструдера до  $450^\circ\text{C}$
- Температура камеры  $200^\circ\text{C}$



**Аморфный полиэфиримид**

Образец	Прочность, МПа	Модуль, МПа	Деформация, %
<b>Литье под давлением</b>			
ПЭИ	109,7	$2650 \pm 132,5$	59,3
ПЭИ + 15%УВ	167,3	$7158 \pm 120$	2,70
ПЭИ+ 1%УНВ	113,6	$2803 \pm 65$	28,57
<b>FDM-печать</b>			
ПЭИ	90,1	2527	6,4
ПЭИ+ 15%УВ	106,8	4653	3,13
ПЭИ+ 1%УНВ	97,6	2844	6,13

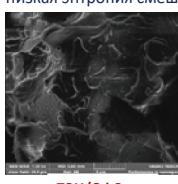
**Эффекты межфазного взаимодействия в смесевых композитах на основе аморфных и кристаллизующихся жесткоцепных высокотермостойких термопластов для 3D печати**

**Исполнители: КБГУ, ИПХФ РАН**

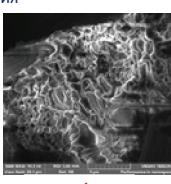
**Цель:** исследование совместимости и морфологии смесевых композитов на основе аморфных и кристаллизующихся жесткоцепных высокотермостойких термопластов; синтез компатibilизирующих добавок для несовместимых смесей на основе аморфных и кристаллизующихся жесткоцепных высокотермостойких термопластов; разработка полимер-полимерных композитов для 3D печати.

Условия смешения веществ:  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S < 0$

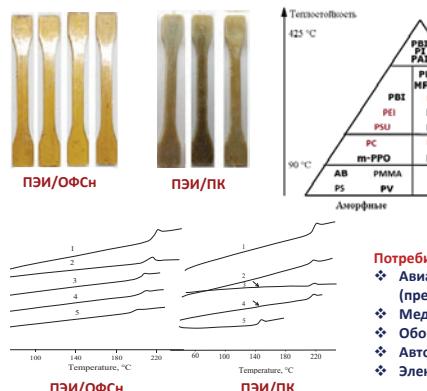
У полимеров, в виду высокой молекулярной массы, низкая энтропия смешения



ПЭИ/ОФчн



ПЭИ/ПК



**Потребители:**

- ❖ Авиакосмическая отрасль (предприятия Роскосмоса);
- ❖ Медицинская отрасль;
- ❖ Оборонная промышленность;
- ❖ Автомобилестроение;
- ❖ Электротехника.

**Ожидаемые результаты:**

- ❖ Выявление особенности морфологии смесей аморфных и кристаллизующихся высокотермостойких термопластов;
- ❖ Синтез компатibilизирующих добавок;
- ❖ Композиты с регулируемой кинетикой кристаллизации для 3D печати.

**Разработка отечественных высоконаполненных композиционных материалов нового поколения на основе полиэфиркетонов для 3D печати методом FDM**

**Исполнители: КБГУ, ИПХФ РАН**

**Цель:** разработка высоконаполненных композиционных материалов на основе полиэфиркетонов различной кристалличности с углеродными и стеклянными волокнами, способных перерабатываться методами 3D печати, позволяющих конструировать высоконагруженные изделия повышенной сложности, которые невозможно изготовить в рамках традиционных материалов и технологий, обеспечивающих технологическую независимость, импортозамещение и обладающих экспортным потенциалом.

**Механические свойства отлитых и напечатанных ПЭЭК**

Состав	Еизг, МПа	Ераст, МПа	$\sigma_p$ , МПа	$\sigma_t$ , МПа	$\epsilon_p$ , %
ПЭЭК литье	3740	2970	104,6	96,2	86,0
ПЭЭК печать	3900	3100	43	-	1,6
СПЭК-50 литье	2850	2700	98,5	97	81
СПЭК-50 печать	3120	2500	67,0	-	4,4

**Детали из угленаполненного ПЭЭК**



Нить для печати и напечатанные детали из ПЭЭК

**Механические свойства угленаполненных композитов на основе ПЭЭК**

Материал	ПТР, г/10 мин	$A_p$ , кДж/м <sup>2</sup>	$E_{\text{изг}}$ , ГПа	$E_{\text{раст}}$ , ГПа	$\sigma_{\text{разр}}$ , МПа	$\epsilon$ , %
ПЭЭК	21,5	н/р	7,9	3,5	3,2	109
40 % УВ						
ПЭЭК-40	8,5	40	9,5	23,6	15,5	234,0
ПЭЭК-40	57,3	49,5	8,6	22,2	13,4	226,0
50 % УВ						
ПЭЭК-50	7,8	40,0	9,0	33,2	14,1	261,6
ПЭЭК-50	46,5	34,0	7,5	30,4	14,95	246,0

**Ожидаемые результаты:**

- ❖ Технология получения связующего полиэфиркетона различных структур;
- ❖ Технология получения высоконаполненных композитов;
- ❖ Адаптация рецептур и технологических свойств композитов для 3D печати;
- ❖ Печать образцов функциональных деталей (БЛА).

**Потребители:**

- ❖ Авиакосмическая отрасль (предприятия Роскосмоса);
- ❖ Медицинская отрасль;
- ❖ Оборонная промышленность;
- ❖ Автомобилестроительная.

**Создание препрогона базе армирующих нитей, пропитанных многокомпонентными связующими, для применения в 3D-печати методом послойного наплавления (FDM)**

**Исполнитель:** ИНХС РАН

**Цель:** разработка технологии пропитки непрерывного волокна многокомпонентными растворами термостойких термопластов, а также модифицированными реактопластами для получения бездефектных монолитных препрогонов с последующим использованием в 3D-печати

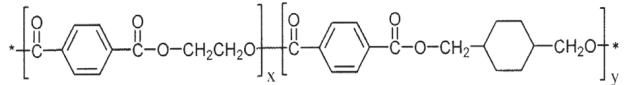
3D FFC-принтер Анизопрнт-Composer



**Схема работы 3D принтера Composer**



**Образцы анизотропно-армированных углепластиков, полученные 3D печатью**



Исходный PET-G

PET-G + 16 % мас. УВ жгута

**Технология получения металлических изделий сложной формы методом FDM с использованием в качестве сырьевых материалов фидстоков, используемых в MIM и PIM технологиях**

**Исполнитель:** ИНХС РАН

**Стальные лопатки из фидстоков**



**МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СОПОСТАВИМЫ!**



Спусковой механизм из титана для винтовки AR-15, изготовленный MIM методом и показанный в состоянии «зеленой» и спеченной детали, изготовлен Mimest SpA, Тренто, Италия



Единичная MIM лопасть компрессора (а) и MIM блок лопастей (б), изготовленные из жаропрочного сплава IN718 (Maetta Sciences, Pratt and Whitney)

**Разработка аморфных и аморфно-кристаллических «интеллектуальных» материалов на основе конструкционных и суперконструкционных полимеров и получение принципиально новых фундаментальных знаний о 4D печати с их применением**

**Исполнитель:** КБГУ, ФГУП ВИАМ, ВНИИХТ Росатом

**Цель:** синтез суперконструкционных полимеров из класса **полиэфиркетонов** с регулируемой морфологией и выявление фундаментальных основ зависимости эффекта памяти формы от химической и надмолекулярной структуры полимера для дальнейшего использования в 3D/4D печати.

**4D печать**

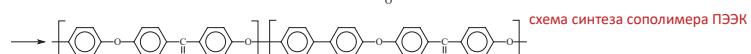
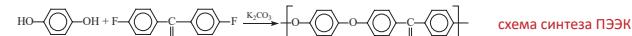


схема синтеза сополимера ПЭЭК

**Параметры оценки эффекта памяти формы ПЭЭК и СПЭЭК**

Наименование показателя	ПЭЭК	СПЭЭК
Степень фиксации деформации, %, не менее	80	70
Степень восстановления деформации, %, не менее	80	70
Предельная деформация программирования, %, не менее	10	10
Температура восстановления, °C, не менее	120	120

**Ожидаемые результаты:**

- ❖ Исследование эффекта памяти формы суперконструкционных (ЭПФ) полимеров;
- ❖ Технология получения ПЭЭК с различной кристалличностью;
- ❖ Выявление влияния химической и надмолекулярной структуры ПЭЭК на ЭПФ;
- ❖ 3D/4D печать изделий.

**Потребители:**

- ❖ Авиакосмическая отрасль (предприятия Роскосмоса);
- ❖ Медицинская отрасль;
- ❖ Оборонная промышленность
- ❖ Робототехника.

## Моделирование и исследование механических свойств изделий из суперконструкционных полимеров и композитов на их основе, полученных методами литья под давлением и 3D печати

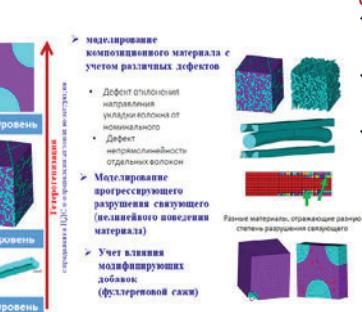
**Исполнители:** КБГУ, СПбПУ

**Цель:** выявление влияния технологических параметров 3D-печати методом FDM на механические свойства напечатанных образцов из аморфных и кристаллизующихся жесткоцепочных высокотермостойких термопластов, а также композитов на их основе и использованием метода многоуровневого моделирования для прогнозирования свойств напечатанных изделий.

### Регулируемые параметры печати метода FDM



### Метод многоуровневого моделирования



Напечатанные образцы из ПФСн

### Ожидаемые результаты:

- Установление зависимости механических свойств суперконструкционных полимеров от режимов печати;
- Расчет механических свойств посредством метода многоуровневого моделирования;
- Выявление влияния дефектов на свойства напечатанных изделий.

### Потребители:

- Отрасль аддитивных технологий
- Предприятия оборонной промышленности;
- Медицинская отрасль;
- Авиакосмическая отрасль.

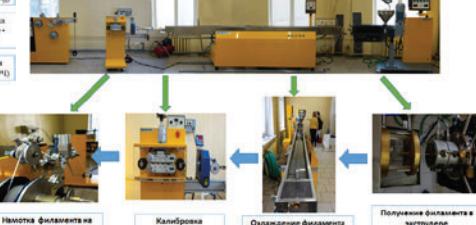
## Разработка критериев и технологии получения армированных (АрПКМ) и дисперсно-наполненных (ДНПКМ) отечественных композиционных материалов на основе высокотермостойких полимерных матриц с заданной структурой и оптимальными технологическими и эксплуатационными свойствами для 3D печати методом FDM

**Исполнитель:** РТУ МИРЭА

**Цель:** разработка критериев и технологии получения армированных (АрПКМ) и дисперсно-наполненных (ДНПКМ) композиционных материалов с регулируемой структурой и комплексом технологических и эксплуатационных свойств для 3D печати методом FDM



### Экструзионная линия для производства высокотемпературного термопластичного филамента



## Устройство с цифровой программируемой терmostатичной камерой для высокоточной 3D печати отечественными полимерными материалами типа PEEK, PEEK CF/GF и пр

**Исполнитель:** ООО «ВОЛТЕХНО»

**Цель:** создание аддитивного устройства (3Д принтера) для получения высокоточных и крупногабаритных изделий прямого назначения из порошковых фракций отечественных высокоеффективных полимеров типа PEEK

### Задачи для достижения цели

Проведение НИОКР по созданию аддитивного устройства, использующего технологию типа **технологию DIS (direct image sintering)/ PBF** для получения высокоточных изделий прямого назначения из различных порошковых фракций отечественных высокоеффективных полимеров

### Суть проекта

В результате НИОКР будет создан 3Д принтер с цифровой терmostатичной камерой, использующий технологию DIS (direct image sintering)/ PBF областю печати не менее 200 x 200 x 200 мм с дальнейшим масштабированием до 500 x 500 x 500 мм, для получения высокоточных и крупногабаритных изделий прямого назначения из порошковых фракций высокоеффективных полимеров на уровне производства

### Применение результатов проекта

Аэрокосмическая отрасль  
ОПК  
Машиностроение  
Медицина  
Нефтехимия  
Электротехническая промышленность и т.п.

### Задачи по проекту

Профильные НИОКР и производство: аддитивная установка 3D LIFE THERMO для изготовления изделий из высокотемпературных полимеров и композитов методом FDM/FFF и профессиональный 3Д принтер 3D LIFE MASTER с активной термокамерой для печати конструкционными полимерами и композитами



## Разработка головки 3D принтера, обеспечивающей печать порошковыми полимерными композиционными материалами

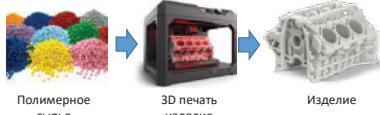
Исполнитель: ЯГТУ

Цель: Проект направлен на разработку специального узла 3D принтера - головки, обеспечивающей печать порошковыми полимерными композиционными материалами по технологии АКФ.

### Классическая схема аддитивного производства



### Схема аддитивного производства после внедрения разработки



- ✓ Исходное сырье для печати - порошковый полимерный композиционный материал
- ✓ Существенное снижение себестоимость печати за счет ухода от использования классического филамента
- ✓ Печатающая головка сможет быть установлена практически на любой 3D принтер и обеспечит стабильно высокое качество печати.

### Разработка головки 3D принтера, обеспечивающей печать термопластами

Проект направлен на разработку специального узла 3D принтера - головки, обеспечивающей печать напрямую гранулами ТЭПа по технологии АКФ. Использование данной головки позволит проводить печать термопластичными материалами с низкой твердостью (менее 65 ед. ШОР А), что не представляется возможным по классической FDM технологии.

Печатающая головка сможет быть установлена практически на любой 3D принтер и обеспечит стабильно высокое качество печати.

## Аддитивные технологии – метод стереолитографии



Фотополимеризация – процесс, в котором жидкий фотополимер выборочно отверждается (полимеризуется) в ванне световым излучением

- стереолитография (SLA),
- двухфотонная (2PP),
- цифровая обработка светом (digital light processing, DLP)

25

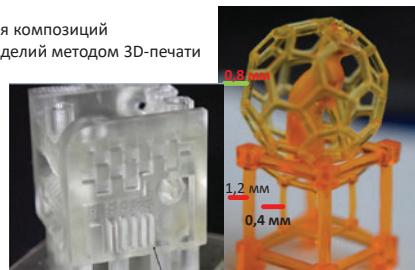
## Разработка фотополимеризующихся композиций для получения методом аддитивных технологий высокопрочных материалов с повышенной теплостойкостью

Исполнитель: ВолгГТУ

Цель: Разработка импортозамещающих технологических фотополимеризующихся композиций для получения высокопрочных теплостойких функциональных материалов и изделий методом 3D-печати

### Задачи проекта:

- Исследование влияния характеристики УФ-излучения (типа источника, интенсивности, длины волны) и толщины слоя на свойства получаемых материалов и прецизионность 3D-печати в зависимости от компонентного состава ФПК
- Создание оптимизированных профилей 3D-печати разработанных ФПК для масштабирования их использования
- Промышленная апробация разработанных ФПК, масштабирование и вывод на рынок



Области применения: 3D-печать прецизионных изделий функционального назначения (в том числе – решение задач реверс-инжиниринга) и мастер-моделей для технологии точного литья металлов

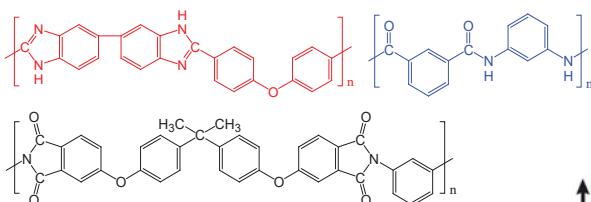


Задел: Разработаны ФПК с вязкостью 200-600 мПа·с для 3D-печати в условиях облучения источником LED 405 нм. Полученные на их основе материалы характеризуются теплостойкостью по HDT до 137 °C при прочности при растяжении до 87 МПа и твердости по Шор Д 89 усл.ед.

## Разработка фоточувствительных композиций на основе ароматических гетероцепенных полимеров для УФ-технологий 3D-печати

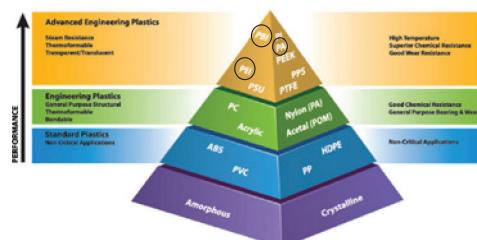
Исполнитель: БИП СО РАН

**Цель:** разработка оригинальных фоточувствительных композиций на основе ароматических гетероцепенных полимеров для формирования термостойких, механически прочных трехмерных объектов с эффектом памяти формы методом DLP 4D-печати.



### Потенциальные области практического применения:

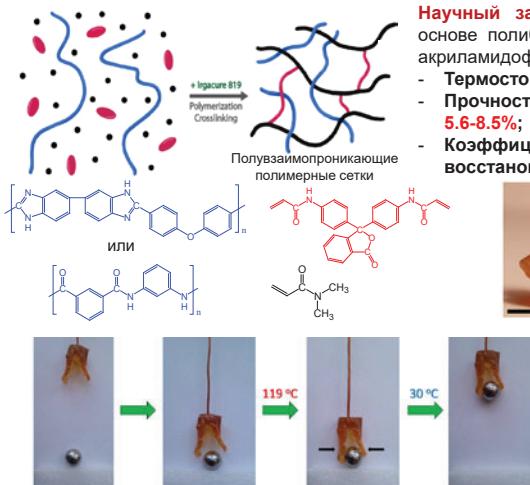
- ❖ Промышленность конструкционных материалов;
- ❖ Авиакосмическая отрасль.



### Свойства ароматических гетероцепенных полимеров:

- ❖ Высокая тепло- и термостойкость;
- ❖ Высокая механическая прочность в широком температурном диапазоне;
- ❖ Огнестойкость;
- ❖ Стойкость к излучению с высокой энергией.

Исполнитель: БИП СО РАН



**Научный задел.** Разработаны фоточувствительные композиции на основе полибензимидазола или ароматического полииамида, 3,3-ди(4'-акриламидофенил)фталида и N,N-диметилакриламида.

- Термостойкость – 393–408°C;
- Прочность на разрыв – 78.4–101.1 МПа, удлинение при разрыве – 5.6–8.5%;
- Коэффициент фиксации формы – 97.1–98.7%, коэффициент восстановления формы – 96.4–97.9%.



Масштаб 5 мм

#### RESEARCH ARTICLE

#### 4D Printing of Shape-Memory Semi-Interpenetrating Polymer Networks Based On Aromatic Heterochain Polymers

Ksenia N. Bardakova,<sup>a</sup> Bato Ch. Kholkhoev,<sup>a</sup> Ivan A. Farion,<sup>a</sup> Evgenii O. Epifanov,<sup>a</sup> Olga S. Korkunova,<sup>a</sup> Yuri M. Efremov,<sup>a</sup> Nikita V. Mineev,<sup>a</sup> Anna B. Solovieva,<sup>a</sup> Peter S. Timashev,<sup>a</sup> and Vitaliy F. Burdakovskii<sup>b</sup>

ADVANCED  
MATERIALS  
TECHNOLOGY

www.advtechol.de

K.N. Bardakova, B.Ch. Kholkhoev, I.A. Farion et al., *Adv. Mater. Technol.*, 2021, 2100790.  
DOI: 10.1002/admt.202100790. Impact Factor = 7.848.

## Аддитивные полимерные технологии в Российской Федерации на основе инновационных отечественных научных разработок

### МАТЕРИАЛЫ

- ✓ Конструкционные и высокотермостойкие термопласти (порошки, филаменты) ПА-12, ПК, ПЭЭК, ПФС, ПЭИ и др.
- ✓ Полимерные композиционные материалы, в том числе высоконаполненные дискретным и непрерывным волокном
- ✓ Полимер-полимерные композиты для 3D печати
- ✓ Фотополимеризующиеся композиции, в том числе на основе термостойких полимеров
- ✓ Фидстоки для 3D печати
- ✓ Полимерные материалы для 4D печати

### ОБОРУДОВАНИЕ

- ✓ Принтер для селективного лазерного спекания высокотермостойких полимерных порошков
- ✓ Принтер для печати по технологии DIS (direct image sintering)/PBF для получения высокоточных изделий прямого назначения
- ✓ Высокотемпературный (3Д принтер) с областью печати не менее, чем 500 x 500 x 500 мм
- ✓ Экструдер для оптимизации установок FDM

### МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ

Моделирование и прогнозирование свойств филамента и напечатанных изделий из полимеров и композитов

### КАДРЫ

- ✓ Подготовка магистров, аспирантов,
- ✓ повышение квалификации
- ✓ сотрудников в рамках совместных проектов
- ✓ и сетевых образовательных программ

Презентация доклада профессора РАН, д.ф.-м.н. Моргунова Романа Борисовича  
«Взаимодействие Дзялошинского-Мория в спиновой орбитронике»

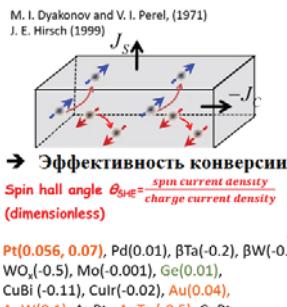


## Проект Tube (Nancy)



### Применение спин-орбитального взаимодействия для SOT – MRAM. Спин-Холл (SHE) и аномальный спин-Холл (AHSE)

$$J_s = \frac{\hbar}{2e} \theta_{\text{SH}} (J_c \times \sigma)$$



#### переключение током через SOT

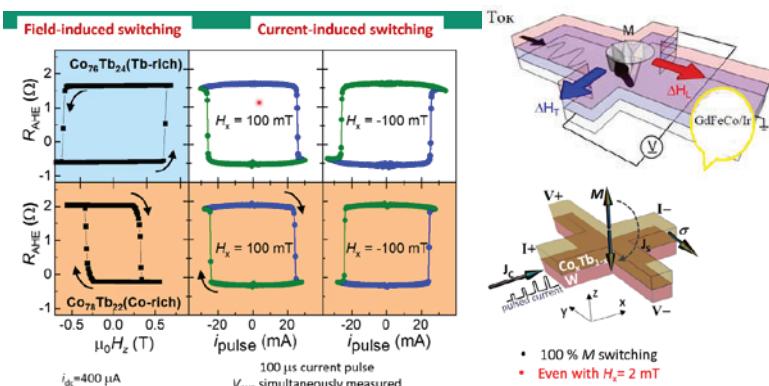
I. M. Miron et al., Nature 476, 789 (2011)  
Liu et al. Science 333, 555 (2012)  
Pt/(Co/Ni)<sub>y</sub>/AlO<sub>x</sub>  
J.C R-S et al. APL 108, 082406 (2016)  
W/Co<sub>x</sub>Tb<sub>y</sub>/AlO<sub>x</sub>  
T.H. Pham, JC R-S et al. (PRAppl 2018)  
Je, JC R-S et al. APL (2018)

#### Ультрабыстрый трехслойный SOT-MRAM

M. Cubukcu et al., APL (2015)  
Switching very fast < 1 ns  
via photoswitcher gpc:  
Kaushal, Gorshch et al. Nat Elect. (2020)

Z. Wang, W. S. Zhao et al., J. Phys. D: 48, 065001 (2015)

### Регистрация SOT и перемагничивание слоя спиновым током в CoTb/Al



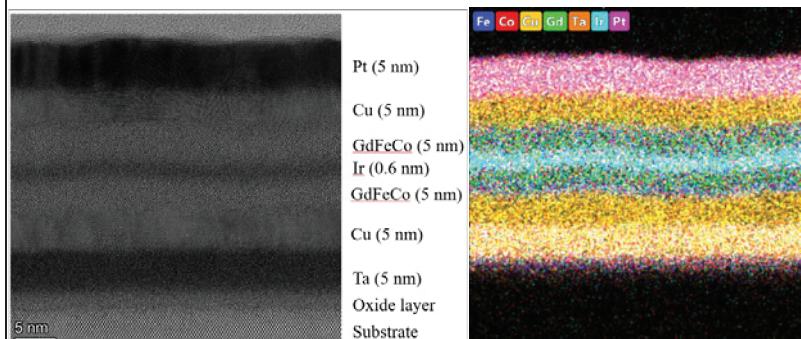


## План

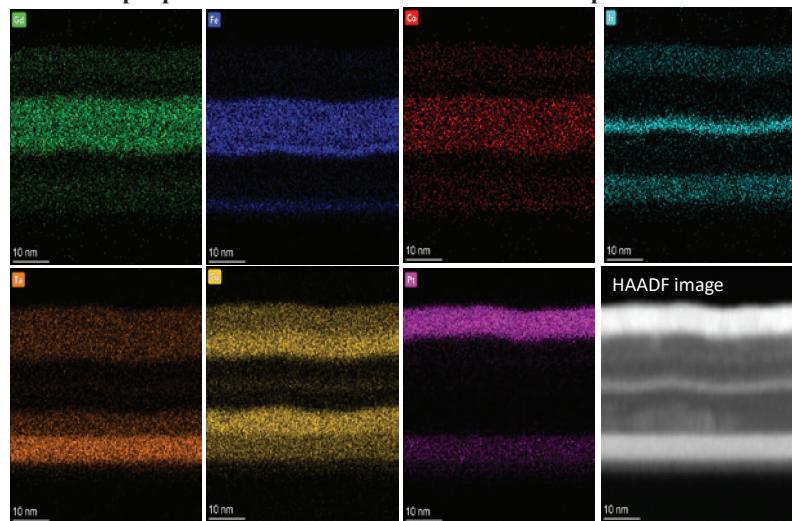
1. Spin torque в двуслойных синтетических ферримагнетиках GdFeCo/Ir/GdFeCo
2. Необычная динамика доменных границ в бислойных синтетических ферримагнетиках Pt/Co/Ir/Co/Pt
3. Осцилляции макроскопического магнитного момента бислойных структур
4. Роль асимметрии расширения зародышей, вызванной DMI, в динамике магнитной релаксации
5. Измерение DMI с помощью спектров BLS спиновых волн

### 1. Spin torque в двуслойных синтетических ферримагнетиках GdFeCo/Ir/GdFeCo

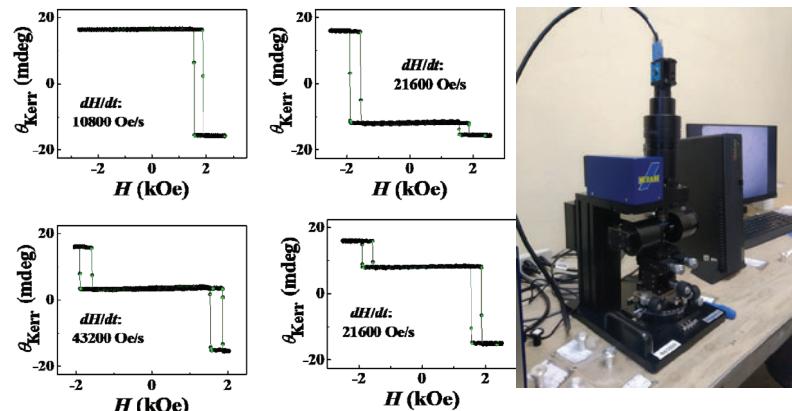
TEM микроскопия и химический анализ поперечного сечения  
Pt/Cu/GdFeCo/Ir/GdFeCo/Cu/Ta/Oxide/Substrate



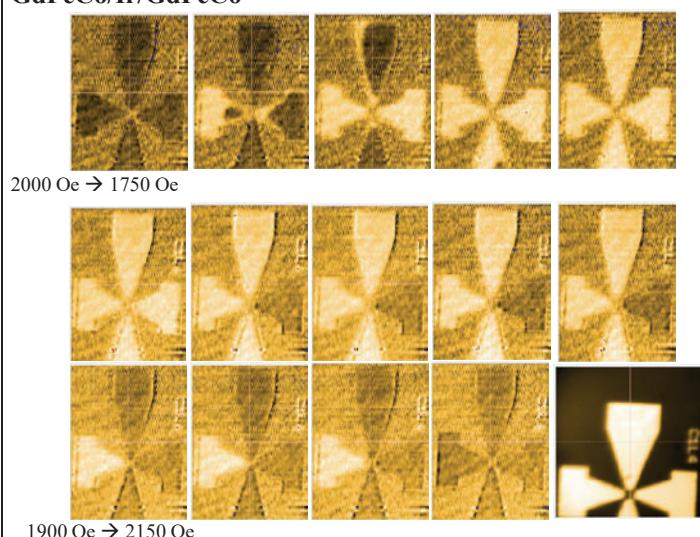
### 1.1.EDX картирование химических элементов в поперечном сечении



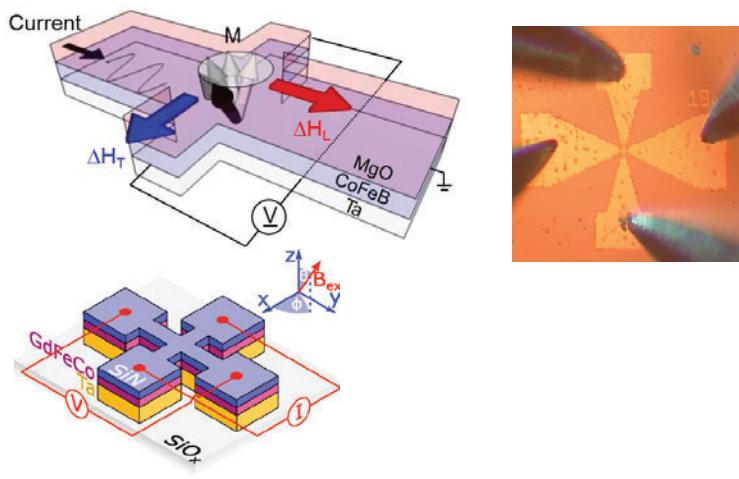
### 1.2. Петли гистерезиса в поперечном эффекте Керра в зависимости от скорости и направления развертки поля



### 1.3.Данные микроскопии Керра о перемагничивании GdFeCo/Ir/GdFeCo

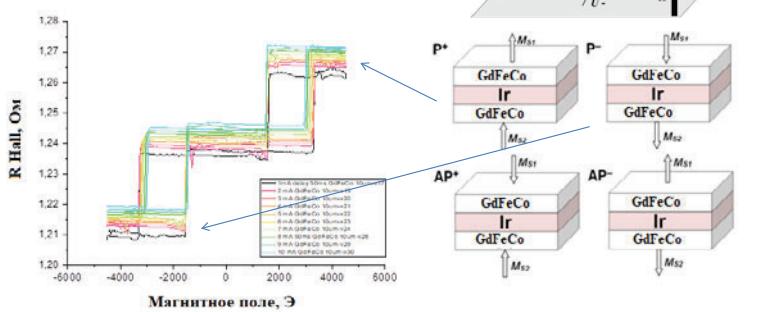


## 1.4. Spin -torque в синтетических антиферромагнетиках GdFeCo



## 1. 6. Spin torque в двуслойных синтетических ферромагнетиках GdFeCo/Ir/GdFeCo

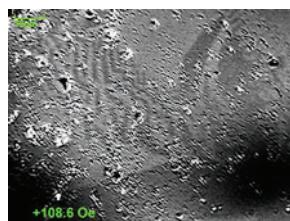
Сопротивление SHE после вычета обычного эффекта Холла



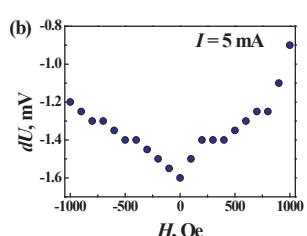
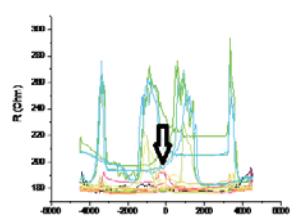
$$\rho_{ASHE} = (\rho_{xy}^{up} + \rho_{xy}^{down})/2$$

$\rho_{xy}^{up}$  – поперечное сопротивление остаточного состояния при  $H = 2$  Т, а  $\rho_{xy}^{down}$  – поперечное сопротивление остаточного состояния при  $H = -2$  Т.

## 1.5. Влияние доменной структуры на Spin-torque



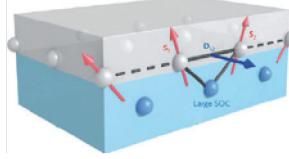
- 1) Продольное сопротивление претерпевает скачок вблизи нулевого магнитного поля, где при переключении намагниченности каждого из слоев, полная намагниченность не меняется.
- 2) Стохастичность амплитуды скачка и независимое обнаружение доменов указывают на то, что доменная структура является его причиной



## 2. Взаимодействие Дзялошинского-Мория

Dzyaloshinskii (1957)

$$E = D_{ij}(\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) - E = D(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)$$

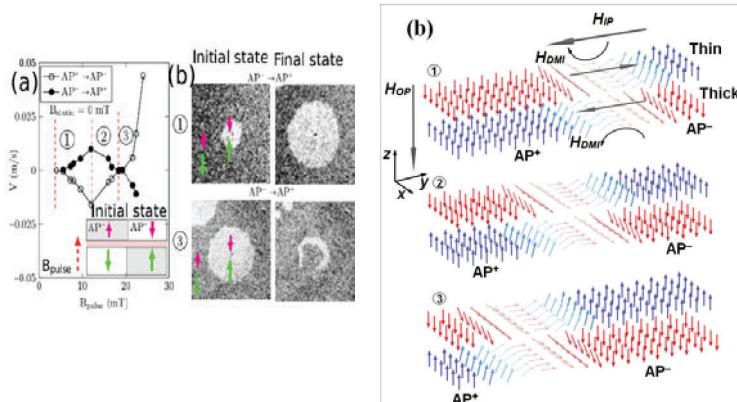


- 1) Отсутствие структурной инверсионной симметрии.
- 2) Хотя отсутствие симметрии может быть локальным, дальнодействующее обменное взаимодействие должно существовать. В средах, где представлены некоррелированные спины, взаимодействия DMI не наблюдается.
- 3) Обмен должен быть косвенным. Это может быть суперобмен или взаимодействие RKKY (А.Ферт и П.Леви).
- 4) Спин-орбитальная связь (SOC) имеет большое значение. SOC должно создавать возмущение на локализованных орбитальных состояниях двух ионов со спинами

	направление распространения	вращение спина
<b>A</b>	+	-
<b>K<sub>b</sub></b>	-	+
<b>D</b>	+	+

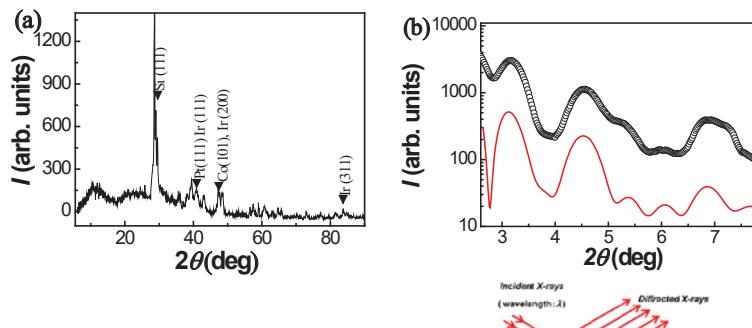
В двуслойной структуре знаки DMI по отношению к внешнему полю разные. Поэтому цель заключалась в установлении закономерностей влияния DMI на перемагничивание обменно-связанных тонких слоев с перпендикулярной анизотропией.

## 2. Необычная динамика доменных границ в бислойных синтетических ферромагнетиках Pt/Co/Ir/Co/Pt

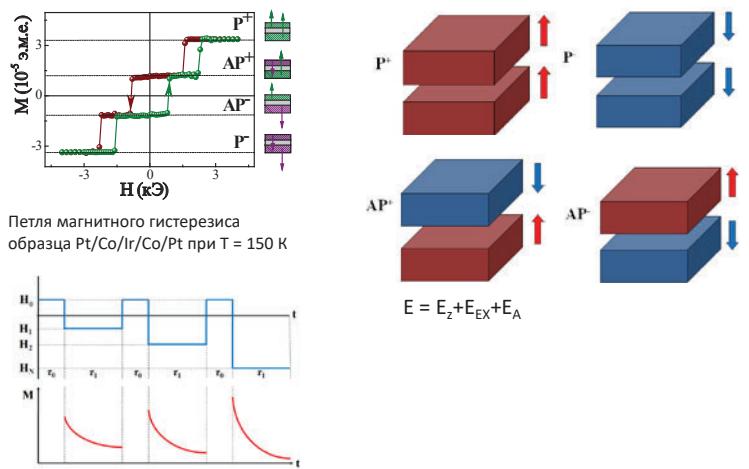


В двуслойной структуре знаки DMI по отношению к внешнему полю разные. Поэтому цель заключалась в установлении закономерностей влияния DMI на перемагничивание обменно-связанных тонких слоев с перпендикулярной анизотропией.

## 2.1. Рентгеноструктурный анализ и малоугловая рентгеновская дифракция

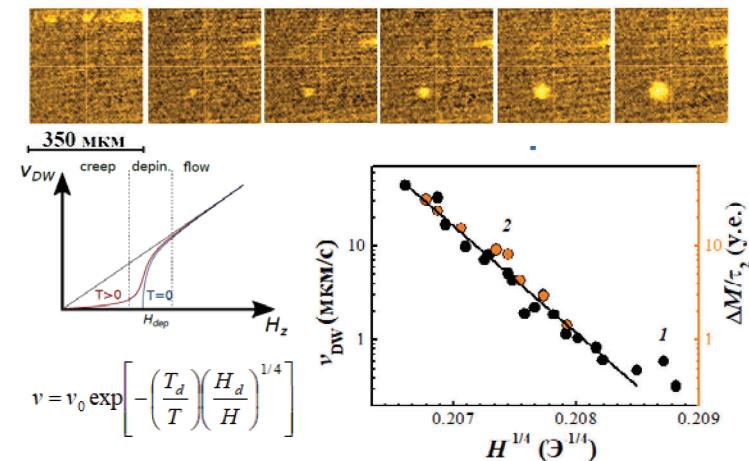


## 2.2. Стационарные состояния Pt/Co/Ir/Co/Pt

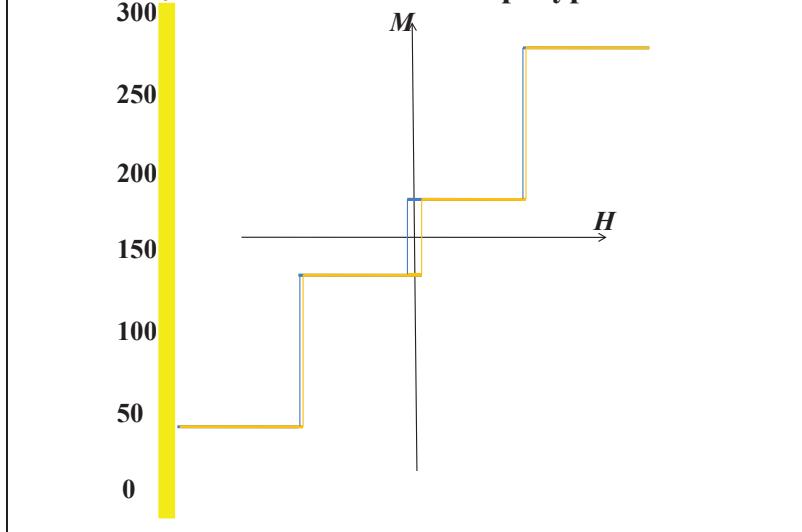


Толщина Ir обеспечивала достаточно слабый обмен между слоями Co, чтобы внешним полем можно переключать 4 состояния. Вдали от поля переключения наблюдалась экспоненциальная динамика релаксации

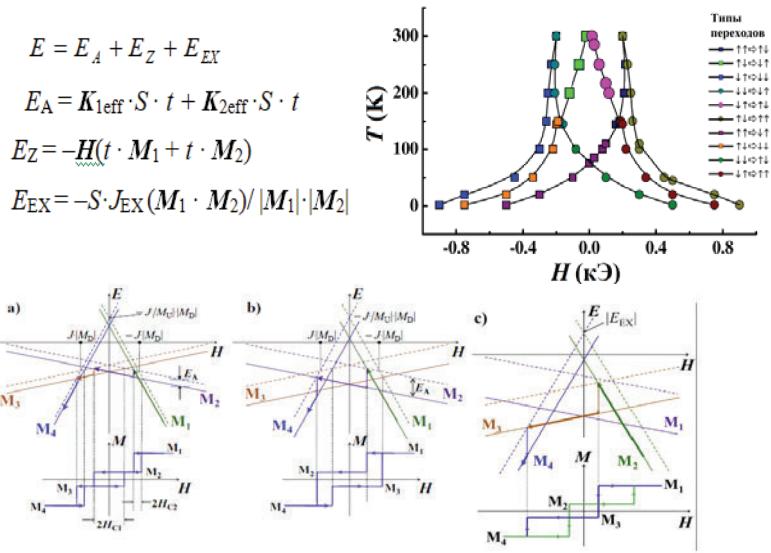
## 2.3. Режим ползучести в отсутствие поля в плоскости образца



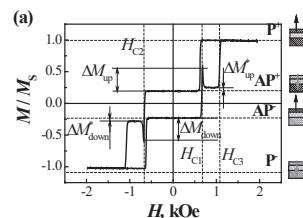
## 2.4. Изменение петли гистерезиса с температурой



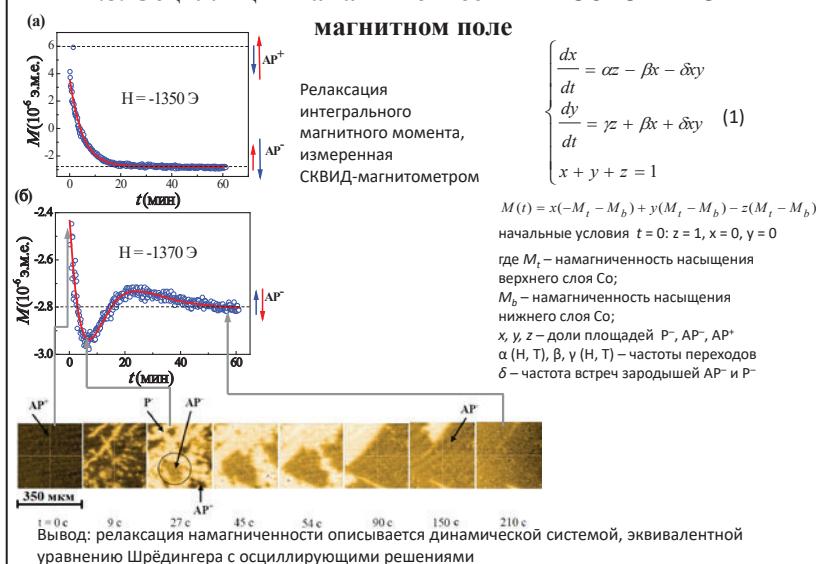
## 2.5. Критические поля переходов между состояниями



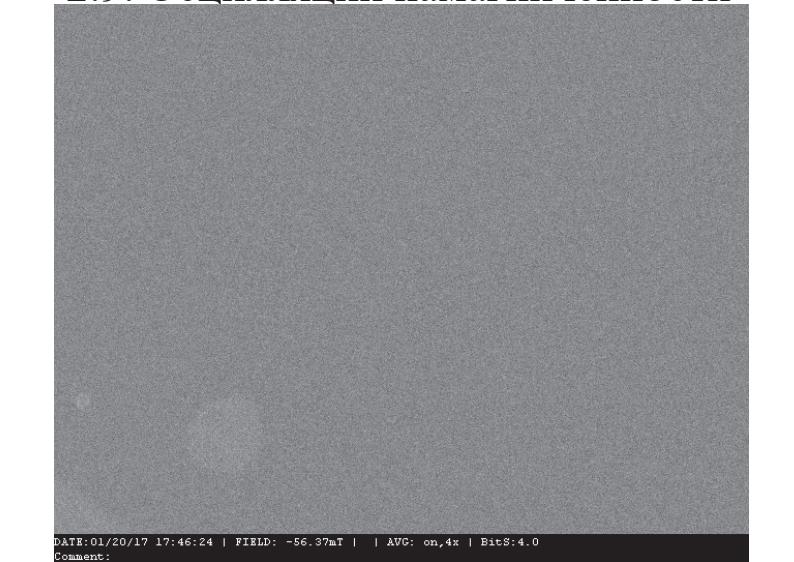
## 2.6. Случайная выборка петель магнитного гистерезиса, записанных в нарастающем магнитном поле



## 2.8. Осцилляции намагниченности в постоянном магнитном поле

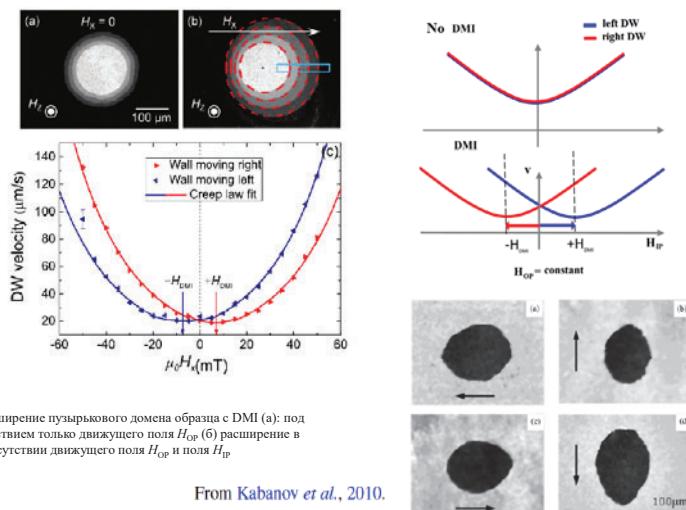


## 2.9. Осцилляции намагніченности

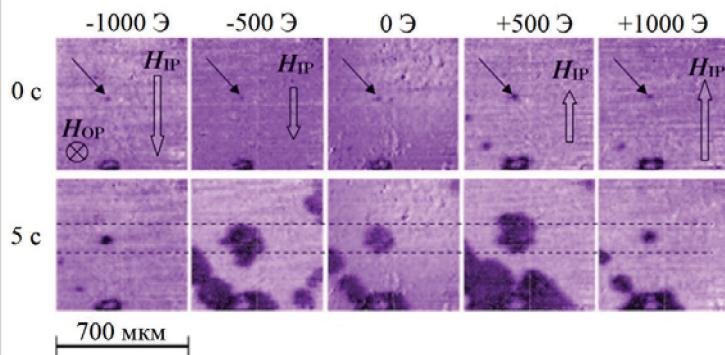


## 3. Асимметричное расширение доменов в однослоином образце

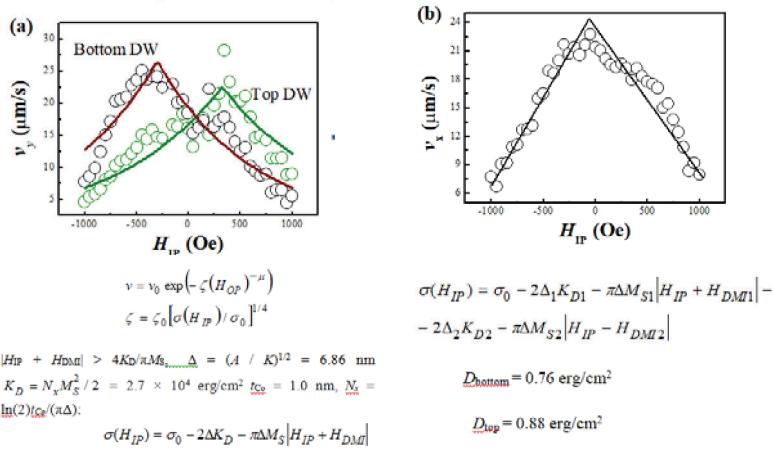
Phys. Rev. B 88, 214401 (2013)



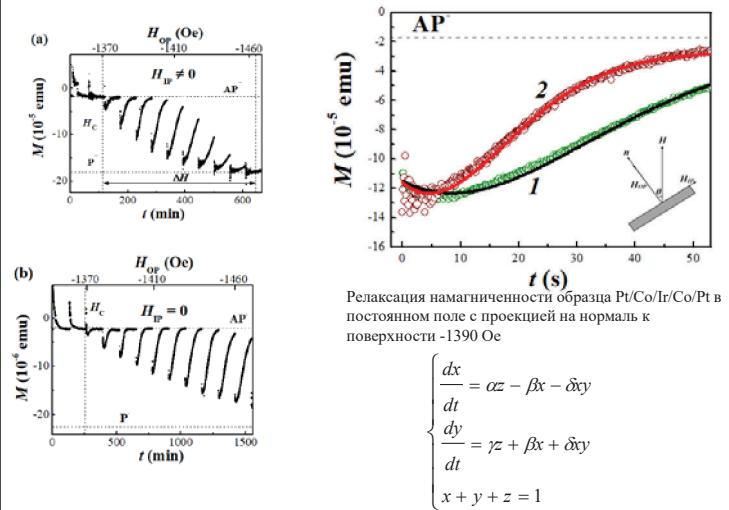
### 3.1. Асимметрия расширения зародыша в бислойном образце



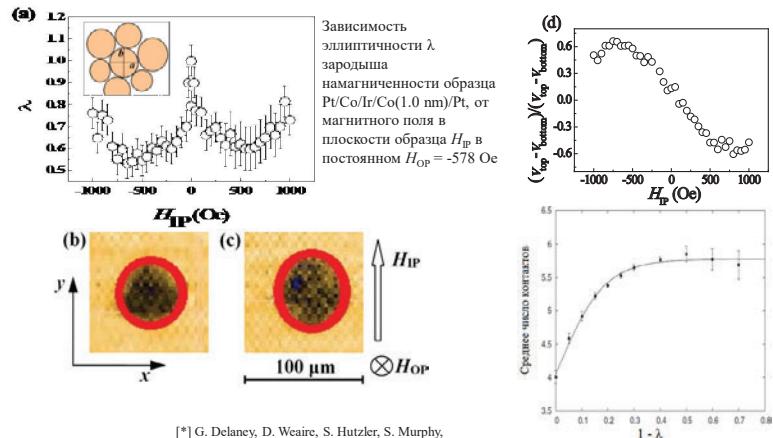
### 3.2. Сложение полей DMI в обменно связанных слоях



### 3. Влияние асимметрии расширения зародышей на кинетику перемагничивания в структурах с DMI

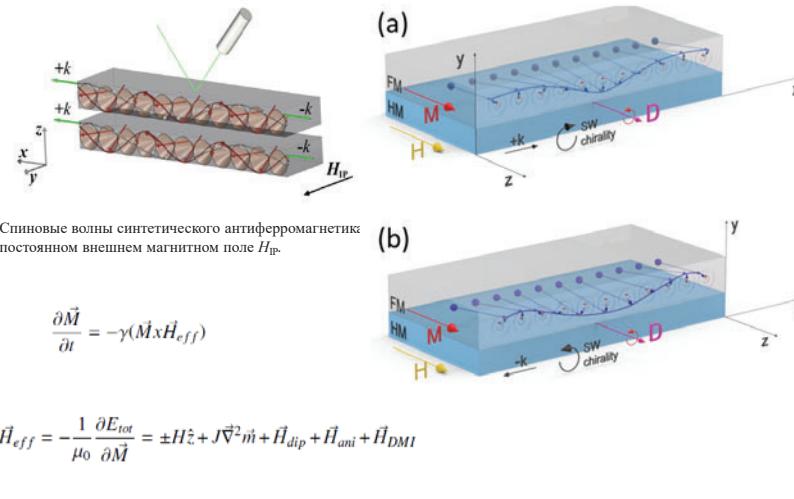


### 3.3. Влияние асимметрии расширения зародышей на кинетику перемагничивания в структурах с DMI

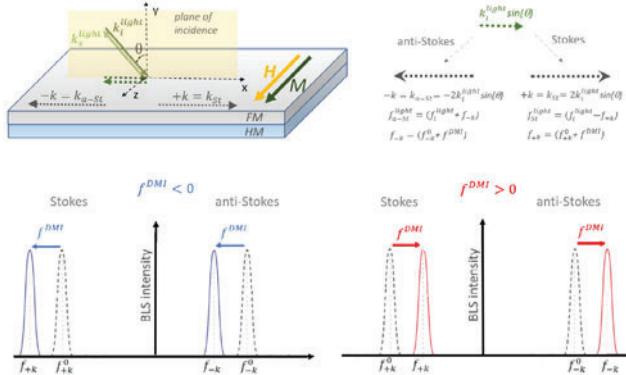


**Вывод:** Взаимодействие Дзялошинского-Мория влияет на магнитную динамику, и на конкуренцию зародышей намагниченности АР- и Р-, через изменение их форм.

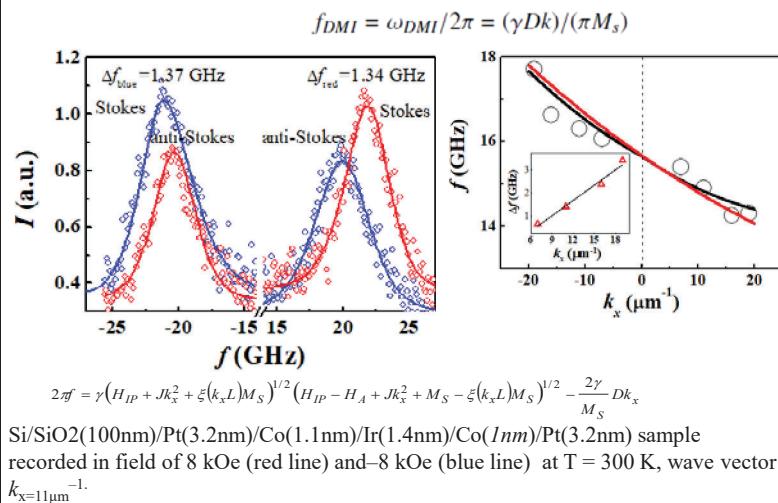
#### 4. Измерение DMI с помощью спектров BLS спиновых волн



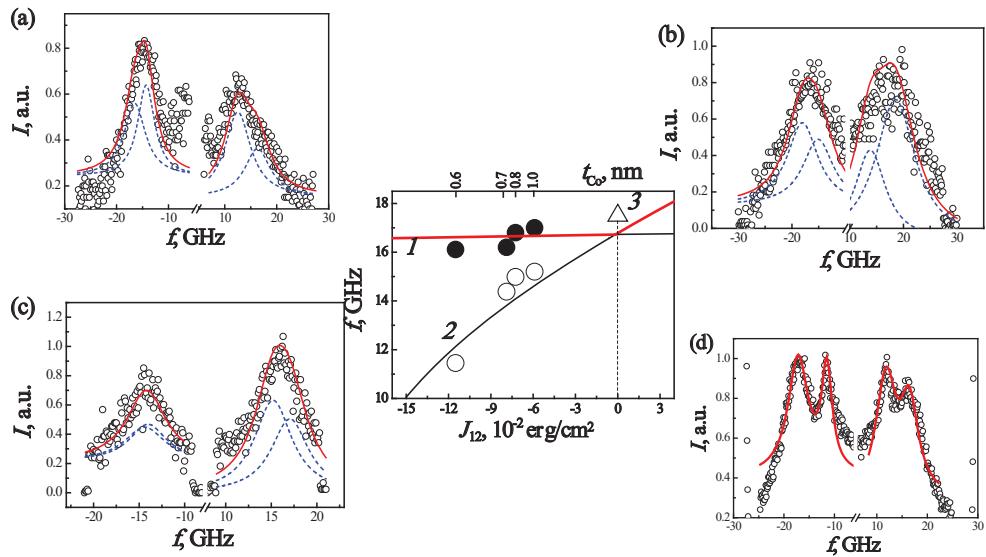
##### 4.1. Влияние DMI на спектры BLS



##### 4.2. Невзаимность спиновых волн

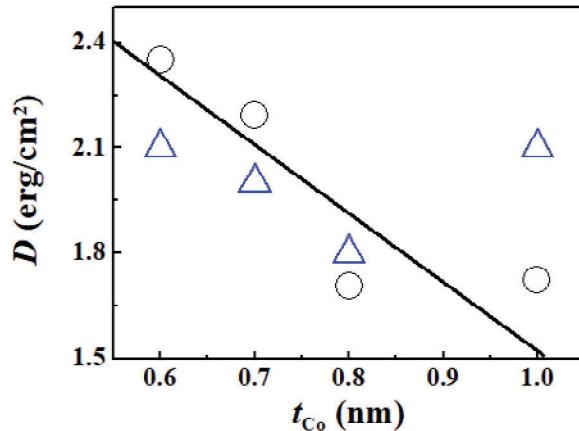


#### 4.3. Оптические и акустические ветви



Спектры Мандельштам-Бриллюэновской спектроскопии записанные в поле  $H_{\text{LP}} = +8 \text{ kOe}$ , при значении проекции волнового вектора лазерного луча  $k_x = 11 \mu\text{m}^{-1}$  для образцов с (a)  $t_{\text{Co}} = 0.7 \text{ nm}$ , (b)  $t_{\text{Co}} = 0.8 \text{ nm}$ , (c)  $t_{\text{Co}} = 1.0 \text{ nm}$ , (d)  $t_{\text{Co}} = 0.6 \text{ nm}$ .

#### 4.4. Плотность энергии взаимодействия Дзялошинского-Мория



Зависимость плотности энергии интерфейсного DMI от толщины верхнего слоя Co  $t_{\text{Co}}$  в синтетических ферромагнетиках Pt(3.2 nm)/Co(1.1 nm)/Ir(1.4 nm)/Co( $t_{\text{Co}}$ )/Pt(3.2 nm).

## Выводы

Исследовано влияние взаимодействия Дзялошинского – Мория (DMI) на динамику перемагничивания синтетических ферромагнетиков с перпендикулярной анизотропией Pt/Co/Ir/Co / Pt. Наблюдается нетривиальная инвертированная зависимость скорости двойной доменной стенки от магнитного поля в плоскости пленки и от перпендикулярного магнитного поля.

Конкуренция вкладов DMI, приводящая к появлению эффективного поля разного знака в двух слоях Co, вызывает немонотонную зависимость  $v$  (HIP). В дополнение к локальному влиянию DMI на асимметричный рост домена, обнаружено макроскопическое проявление DMI в виде перемагничивания, ускоренного приложенным магнитным полем в плоскости пленки.

Ускорение магнитной релаксации обеспечивается за счет индуцированной DMI эллиптичности зародышей намагниченности и соответствующего увеличения частоты их контактов по сравнению с круглыми зародышами в отсутствие поля IP. Полученные результаты важны для устройств спин-орбитроники, где перемагничивание двухслойных структур, разделенных тяжелым металлом, контролируется спин-орбитальным взаимодействием.

PHYSICAL REVIEW B 100, 144407 (2019)

### Oscillatory dynamics of the magnetic moment of a Pt/Co/Ir/Co/Pt synthetic antiferromagnet

R. B. Morgunov<sup>1,2,3,4,\*</sup>, A. V. Yurov,<sup>3</sup> V. A. Yurov,<sup>3</sup> A. D. Talantsev,<sup>1,2,5</sup> A. I. Bezverkhniy,<sup>1,2</sup> and O. V. Kooplak<sup>1,2</sup>

PHYSICAL REVIEW B 98, 064410 (2018)

### Nonmonotonic aftereffect measurements in perpendicular synthetic ferrimagnets

T. Fache,<sup>1</sup> H. S. Tarazona,<sup>2</sup> J. Liu,<sup>3</sup> G. L'vova,<sup>4</sup> M. J. Applegate,<sup>3</sup> J. C. Rojas-Sanchez,<sup>1</sup> S. Petit-Watelot,<sup>1</sup> C. V. Landauro,<sup>2,5</sup> J. Quispe-Marcatoma,<sup>2,5</sup> R. Morgunov,<sup>4,6</sup> C. H. W. Barnes,<sup>3</sup> and S. Mangin<sup>1</sup>

PHYSICAL REVIEW B 100, 004400 (2021)

### Dzyaloshinskii-Moriya interaction probed by magnetization reversal in bilayer Pt/Co/Ir/Co/Pt synthetic ferrimagnets

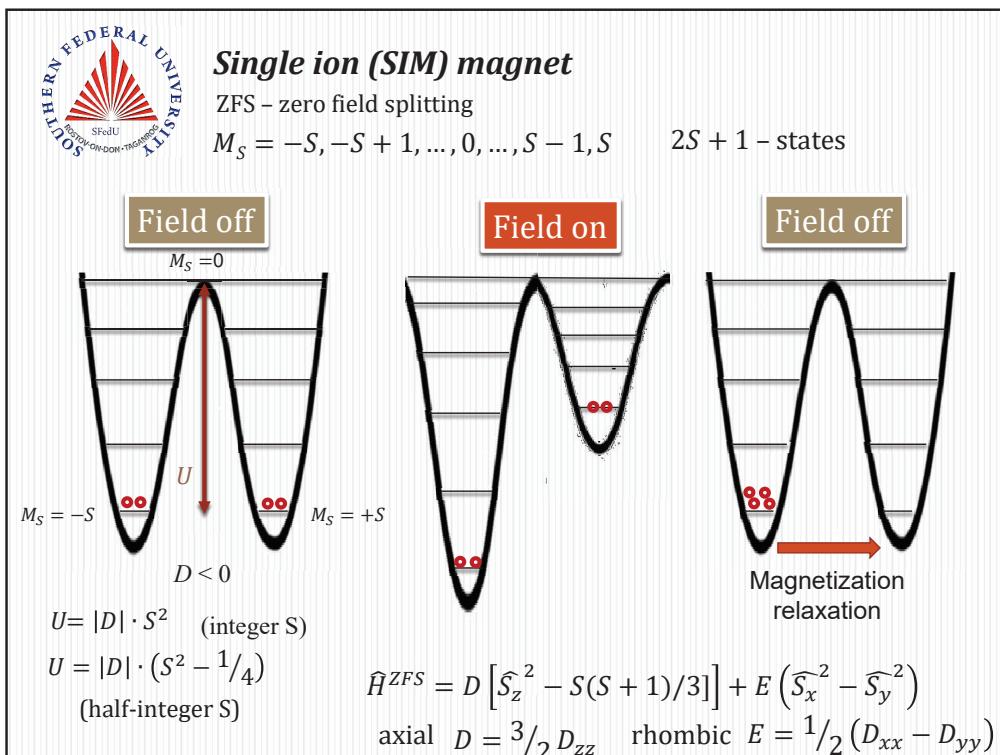
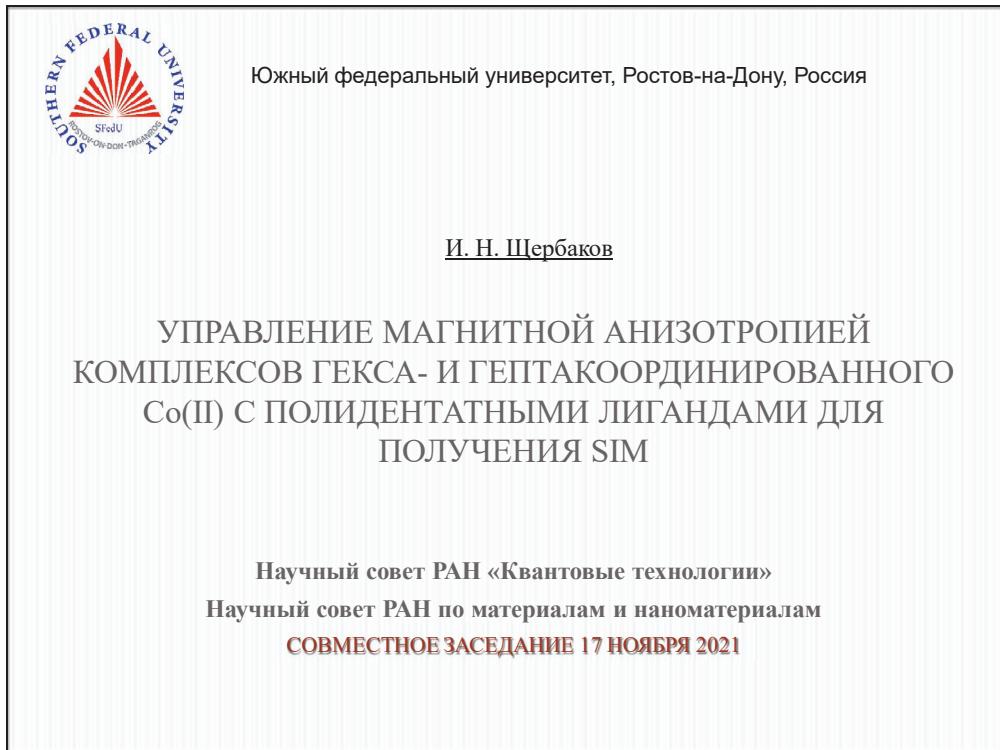
R. B. Morgunov<sup>1,2,\*</sup>, A. I. Bezverkhniy,<sup>1</sup> M. Hehn,<sup>3</sup> J. L. Bello,<sup>3</sup> T. Fache,<sup>3</sup> and S. Mangin<sup>3</sup>

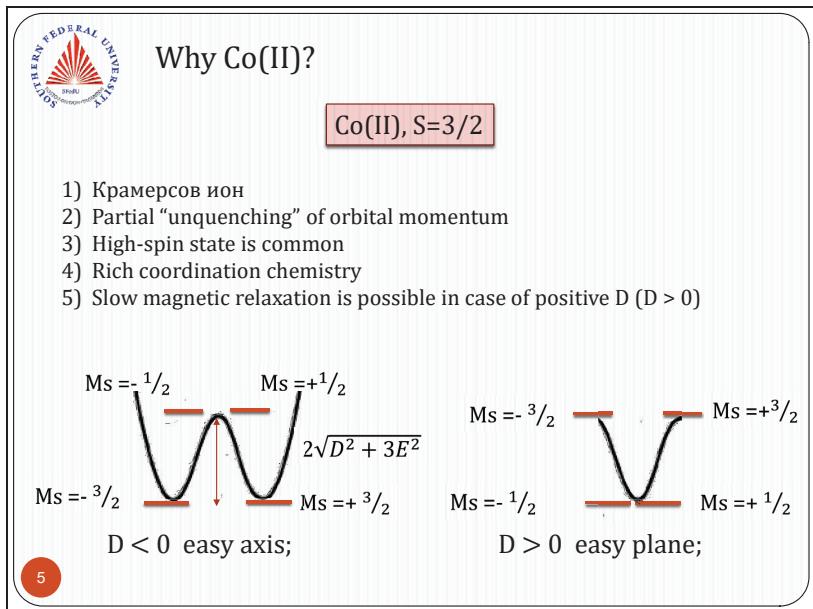
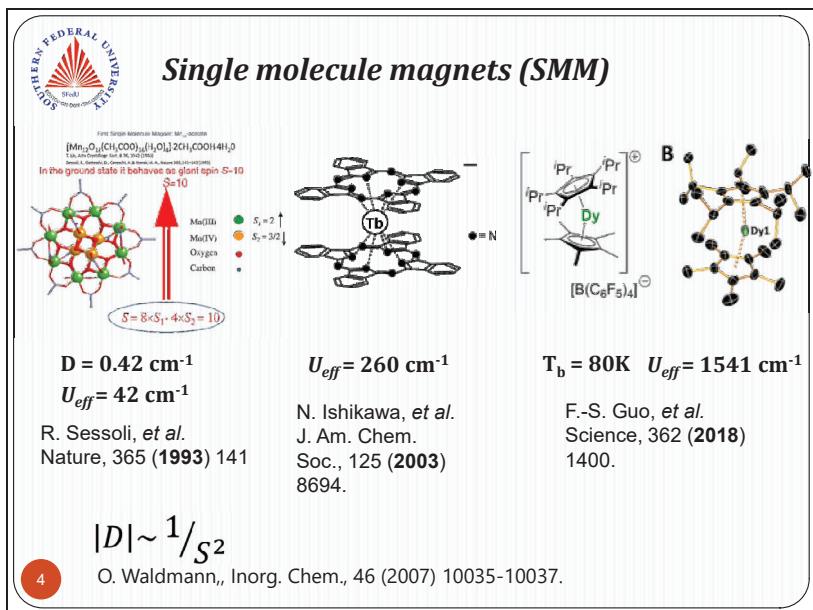
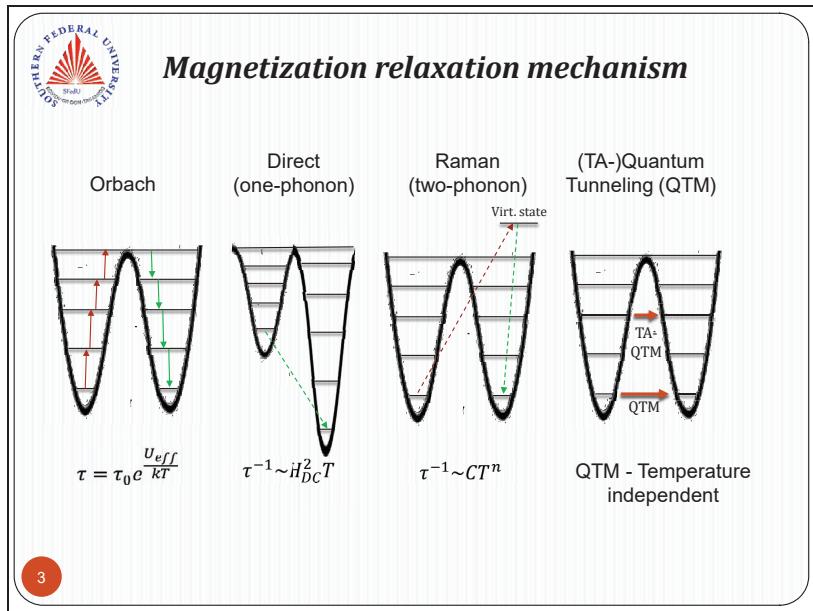
<sup>1</sup>Institute of Problems of Chemical Physics, 142432 Chernogolovka, Russia

<sup>2</sup>I. M. Sechenov First Moscow State Medical University, Ministry of Health of Russia, 119991 Moscow, Russia

<sup>3</sup>Institut Jean Lamour (UMR-CNRS 7198), Université de Lorraine, Vandœuvre-lès-Nancy, France

**Презентация доклада д.х.н. Щербакова Игоря Николаевича  
«Управление магнитной анизотропией комплексов гекса- и гептакоординированного  
Co(II) с полидентатными лигандами для получения SIM»**





**Phenomenological description**

**Co(II)  $O_h$**

ZFS       $D_{4h}$        $O_h$        $D_{4h}$       ZFS

$^4T_{1g}$        $^4E_g$        $^4A_{2g}$        $^2D < 0$

Axial elongated      Axial compressed  
GH is applicable      SH is applicable

**Spin Hamiltonian (SH):**  
 $\hat{H} = D \left[ \hat{S}_Z^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] + E (\hat{S}_X^2 - \hat{S}_Y^2) + \mu_B (B_X g_X \hat{S}_X + B_Y g_Y \hat{S}_Y + B_Z g_Z \hat{S}_Z)$

**Griffith Hamiltonian (GH):**  
 $\hat{H} = -\frac{3}{2} \kappa \lambda \cdot \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \Delta_{ax} \left[ \hat{L}_Z^2 - \frac{1}{3} L(L+1) \right] + \Delta_{rh} (\hat{L}_X^2 - \hat{L}_Y^2) + \mu_B \mathbf{B} \left( g_e \hat{S} - \frac{3}{2} \kappa \hat{\mathbf{L}} \right)$

6

**D dependence on coordination polyhedron symmetry for hexacoordinated Co(II)**

$D, \text{cm}^{-1}$

$TPR6$

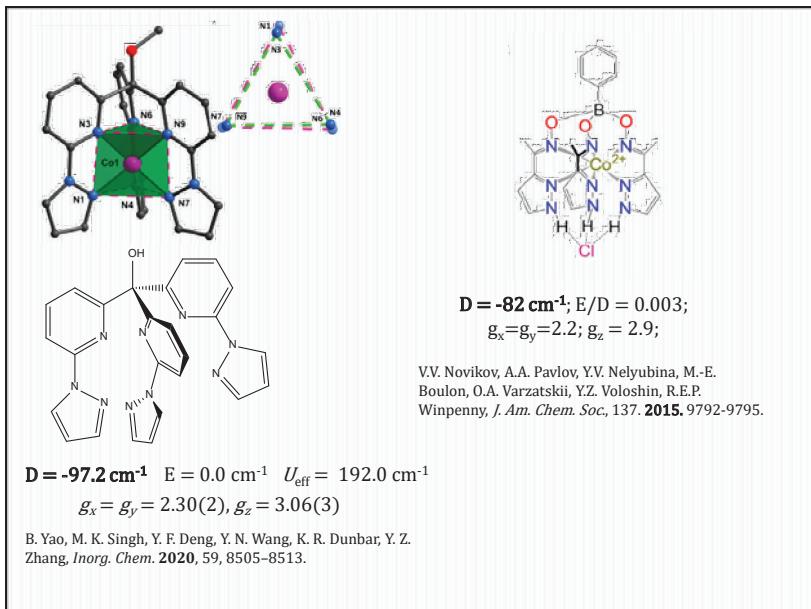
$R^2 = 0.790$

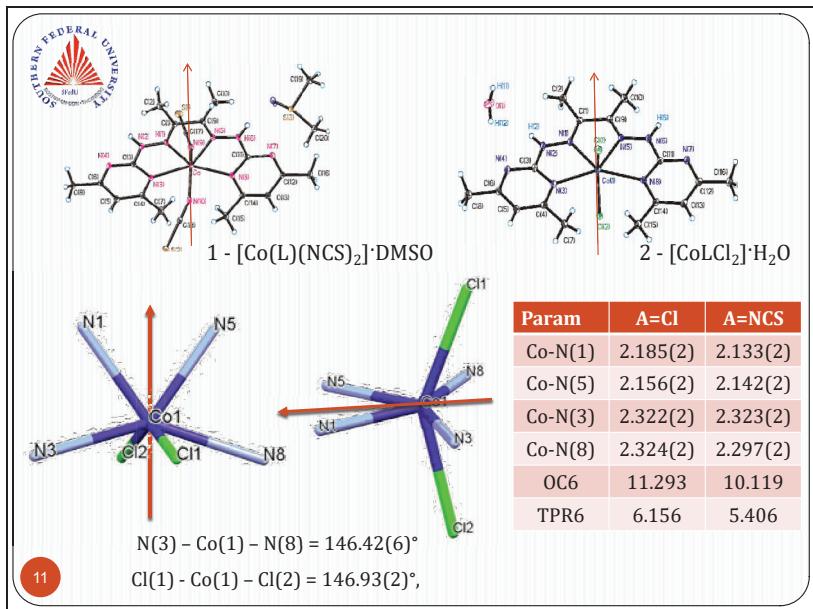
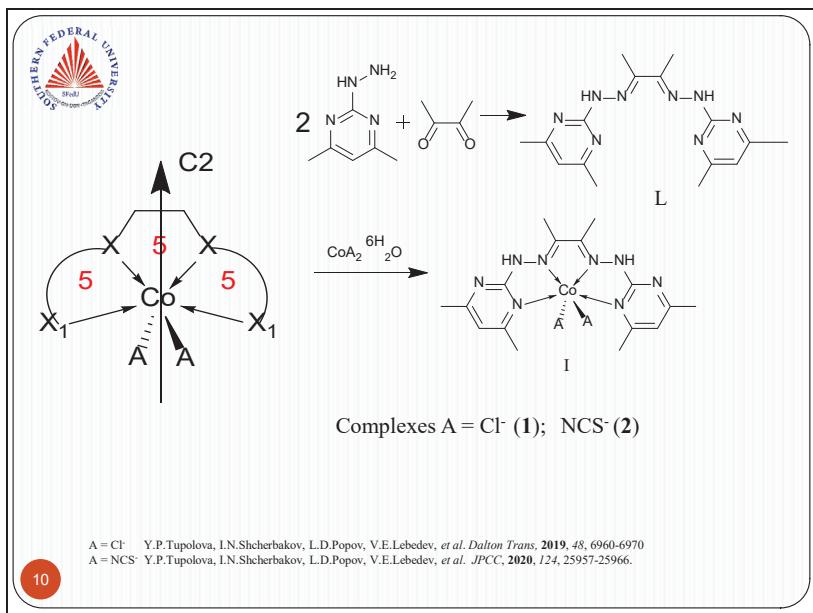
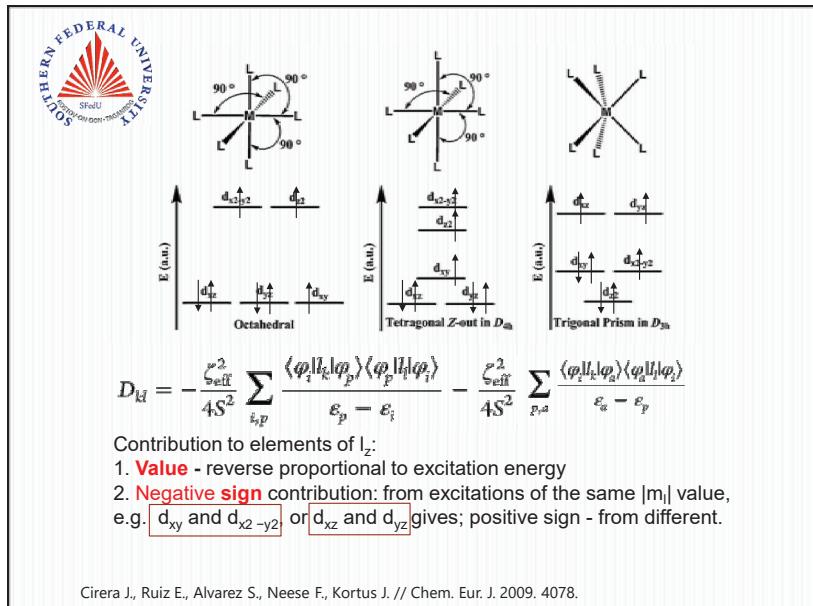
Experimental data on 54 Co(II) compounds with coordination number = 6

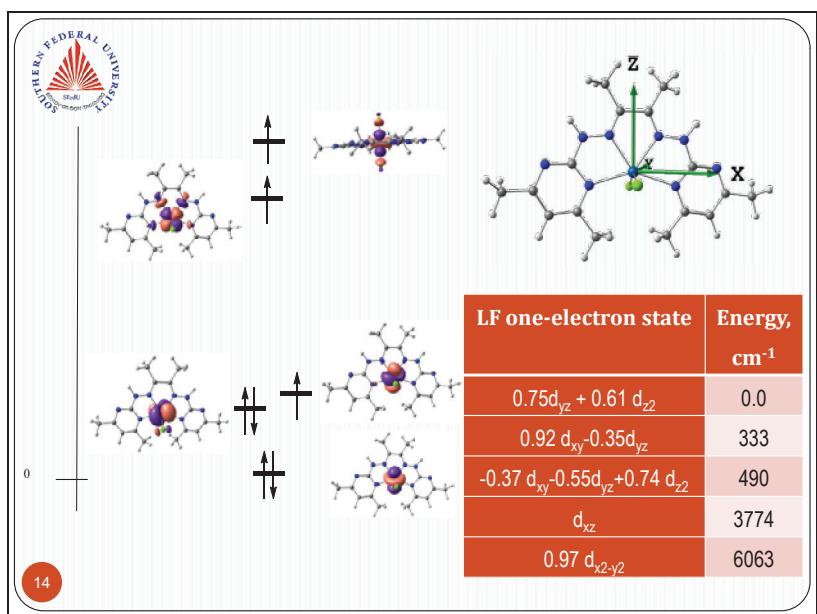
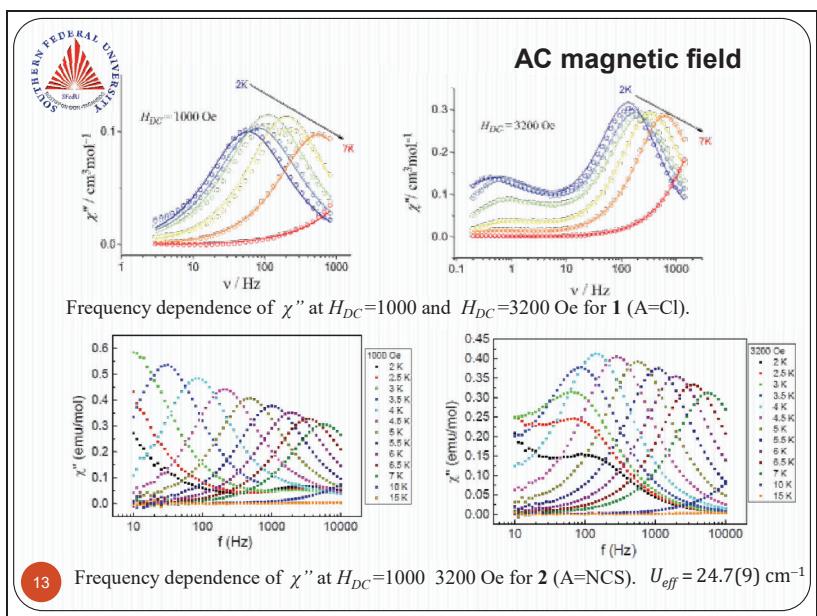
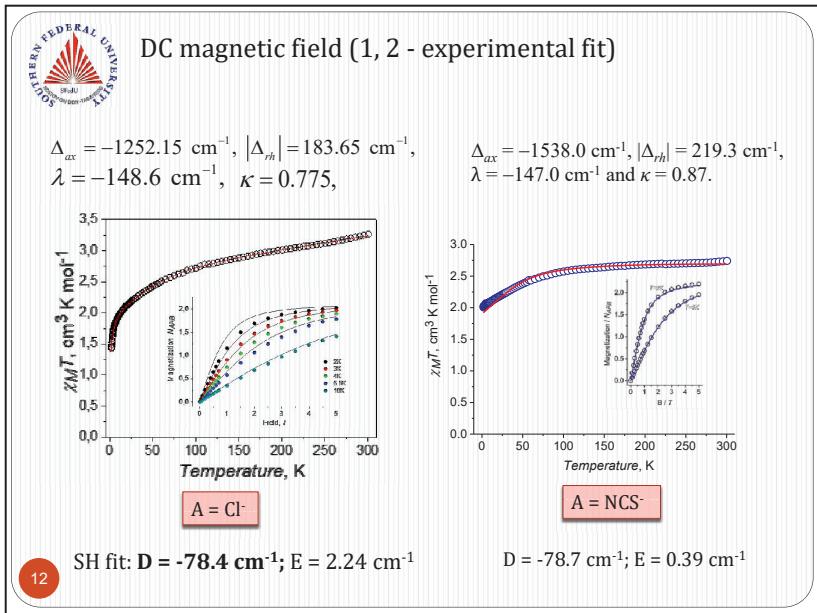
TPR6 – is a continuous symmetry measure of the structure deformation towards ideal trigonal prismatic (TP) symmetry.  
'0' value corresponds to ideal TP symmetry

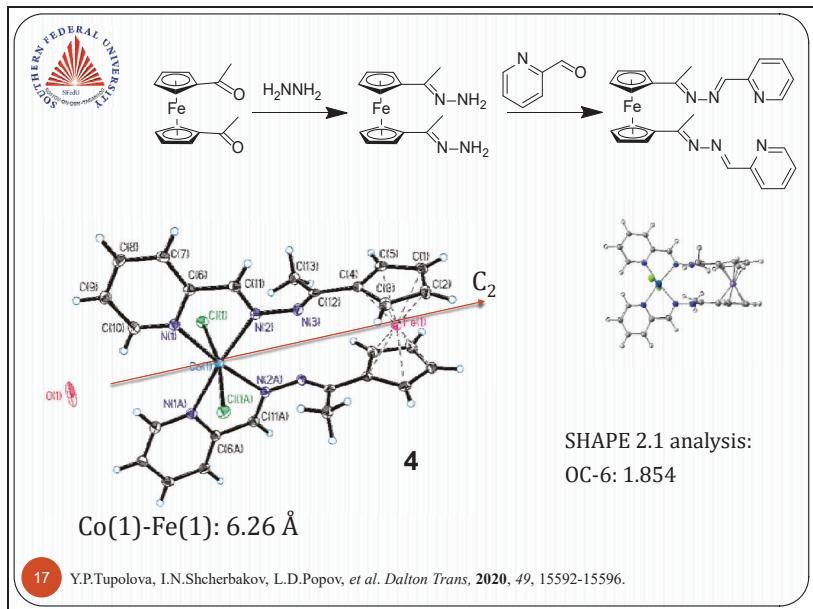
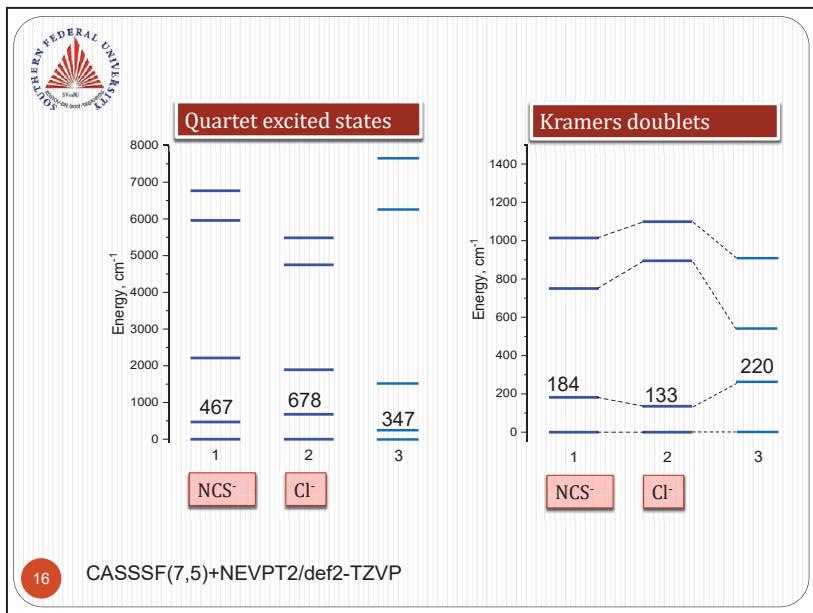
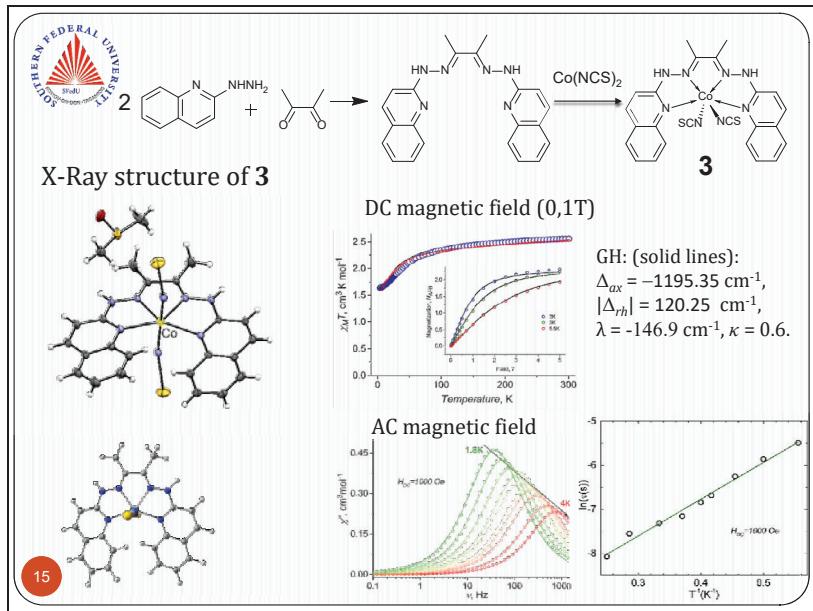
M.Pinsky, et al. *Inorg. Chem.* 1998, 37, 5575-5582

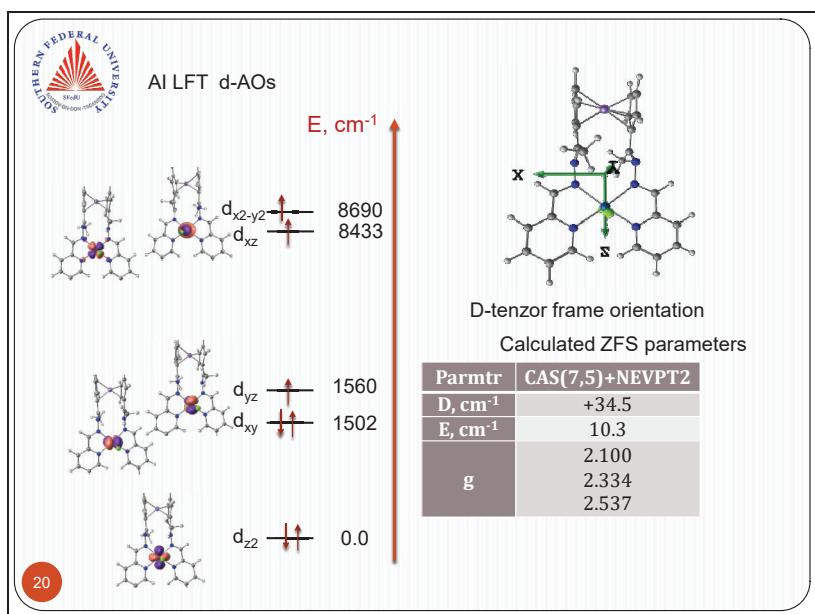
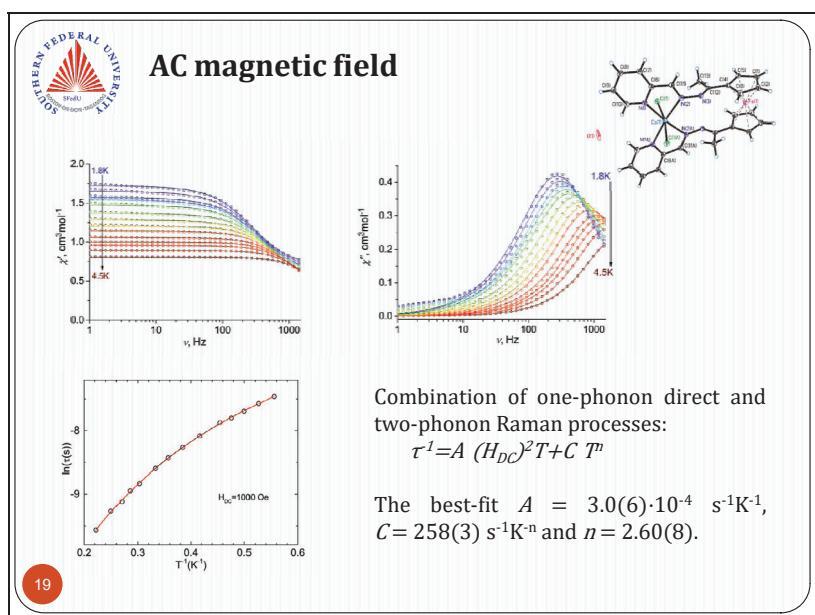
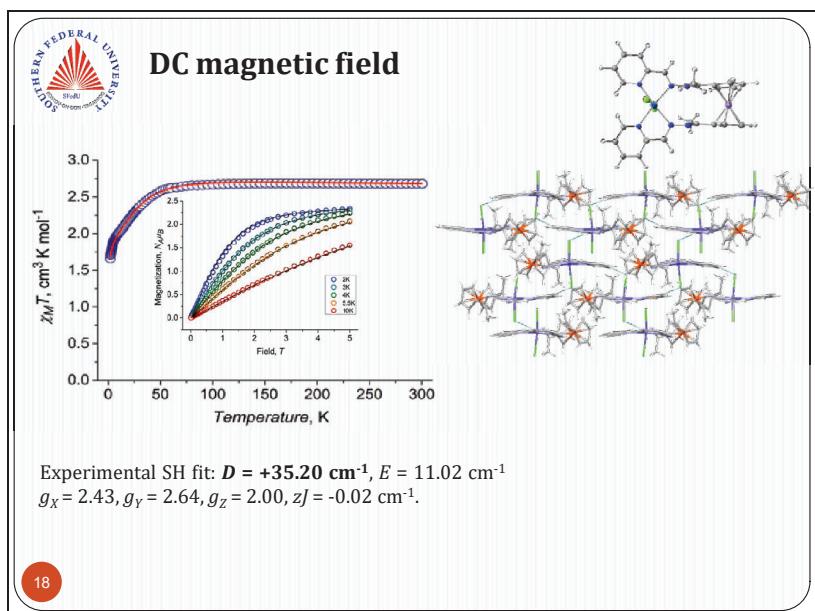
7

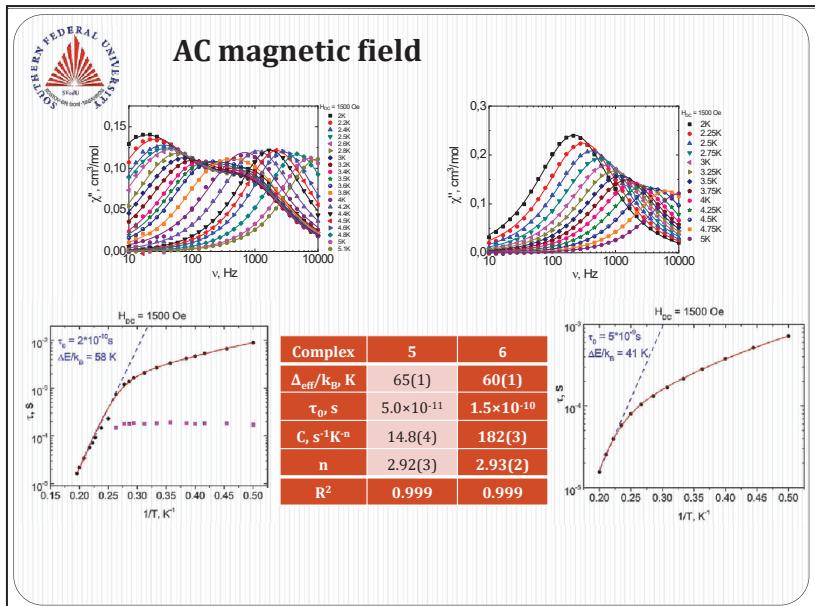
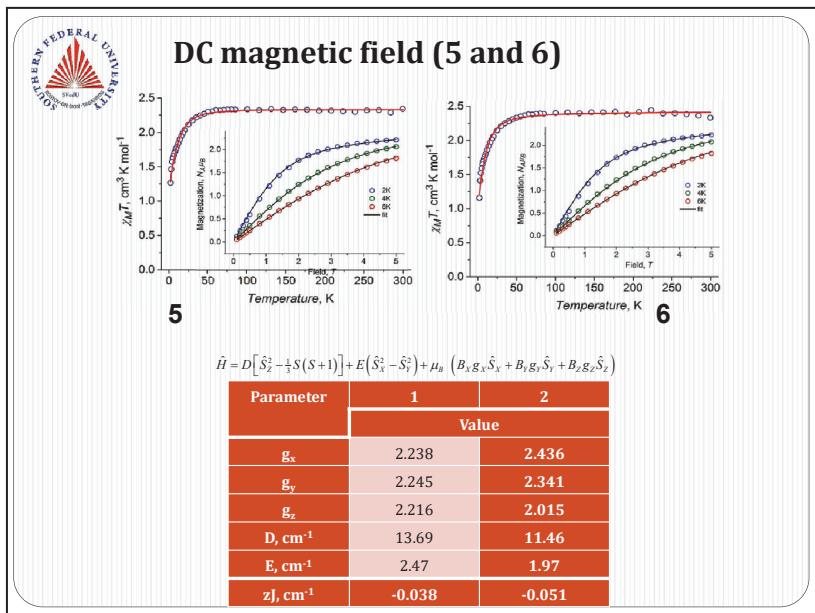
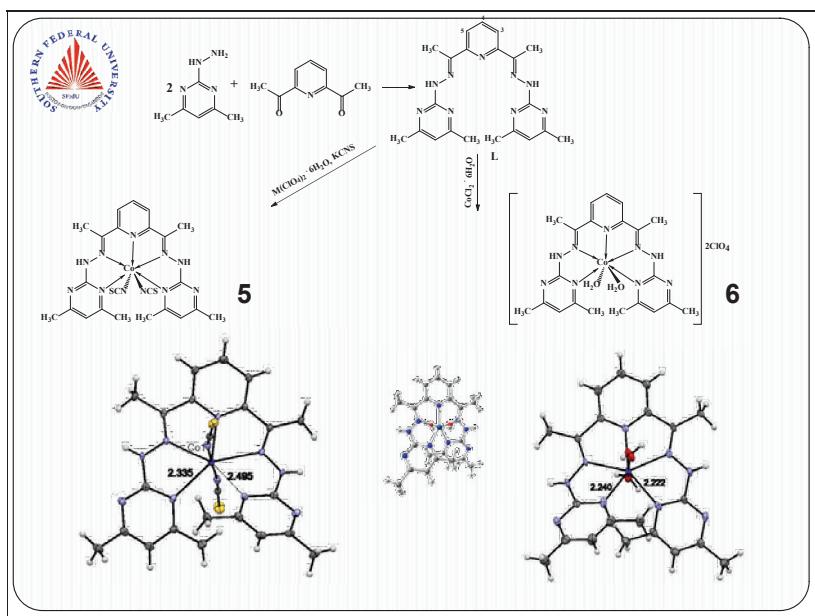














## Основные результаты и выводы

1. Предложен подход к дизайну соединений гексакоординированного Co(II) с высокой магнитной анизотропией
2. Полученные соединения обладают свойствами SIM в приложенном постоянном магнитном поле

## Acknowledgements



Dr. Yulia P. Tupolova - Synthesis of the ligands and coordination compounds



Dr. Leonid D. Popov – synthesis of the ligands and coordination compounds

Academician Sergey Aldoshin, Dr. Denis Korchagin, Dr. Roman Morgunov, Dr. Andrei Palii (DC and AC magnetic field properties, single crystal X-ray diffraction were measured at the IPCP, Chernogolovka)

Support from Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (state contract № AAAA-A19-119092390079-8)

Презентация доклада профессора РАН, д.х.н. Кискина Михаила Александровича и академика Еременко Игоря Леонидовича «Карбоксилатные комплексы кобальта(II) — платформа для модификации магнитных свойств молекулярных магнитов»

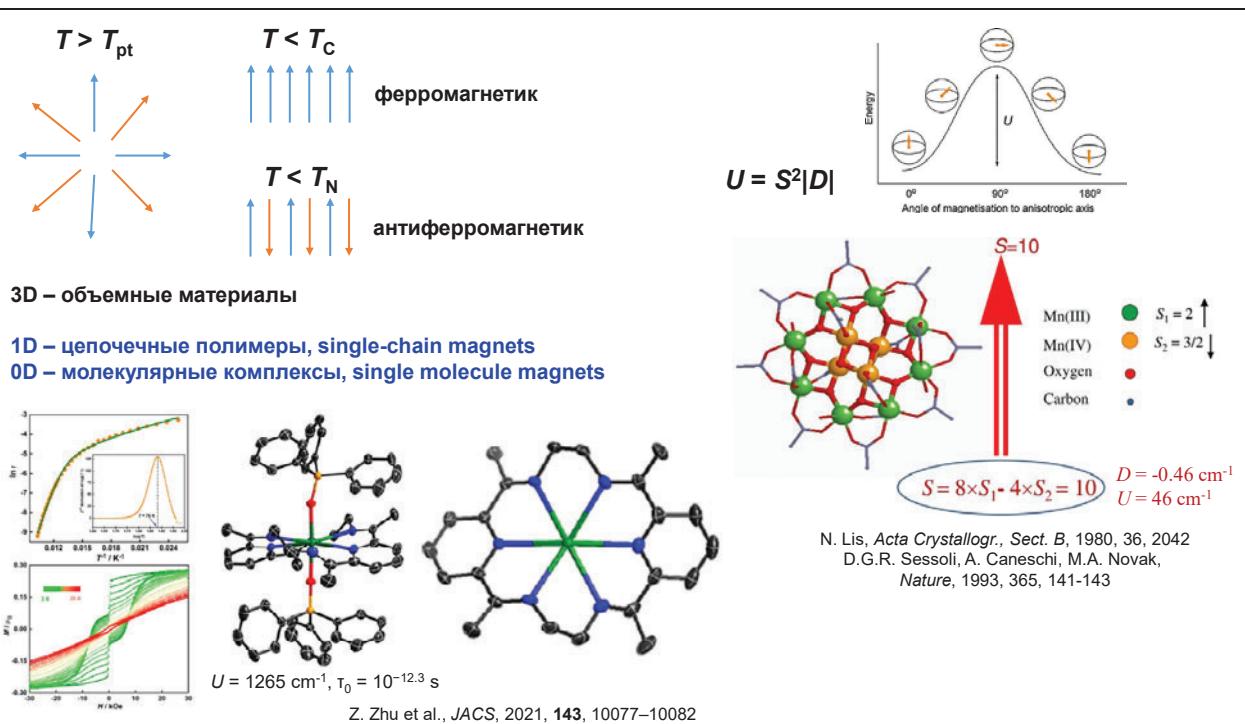
**Научный совет «Квантовые технологии»  
17 ноября 2021**

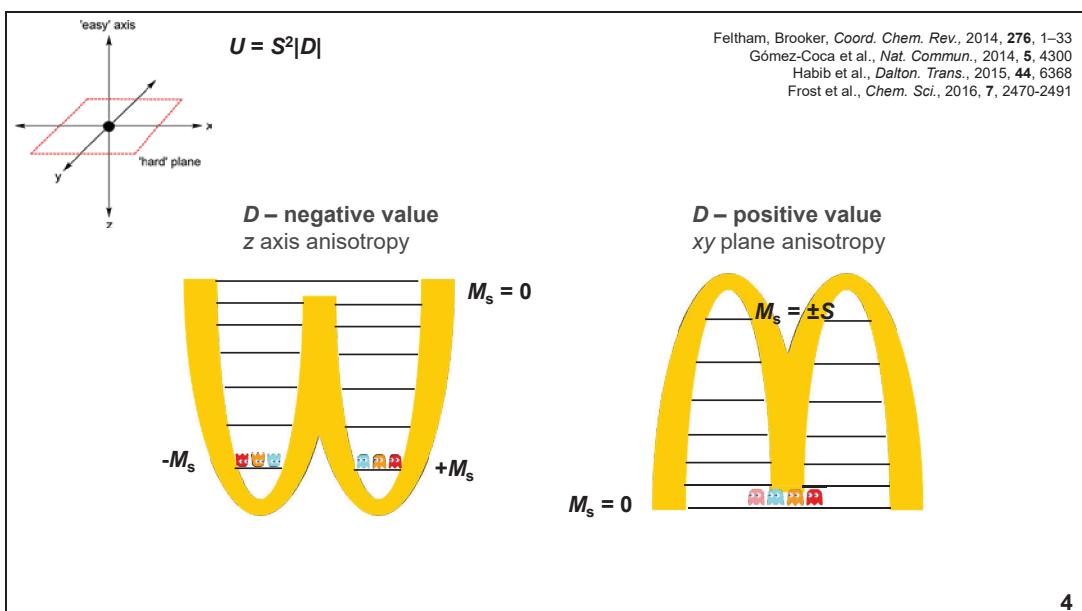
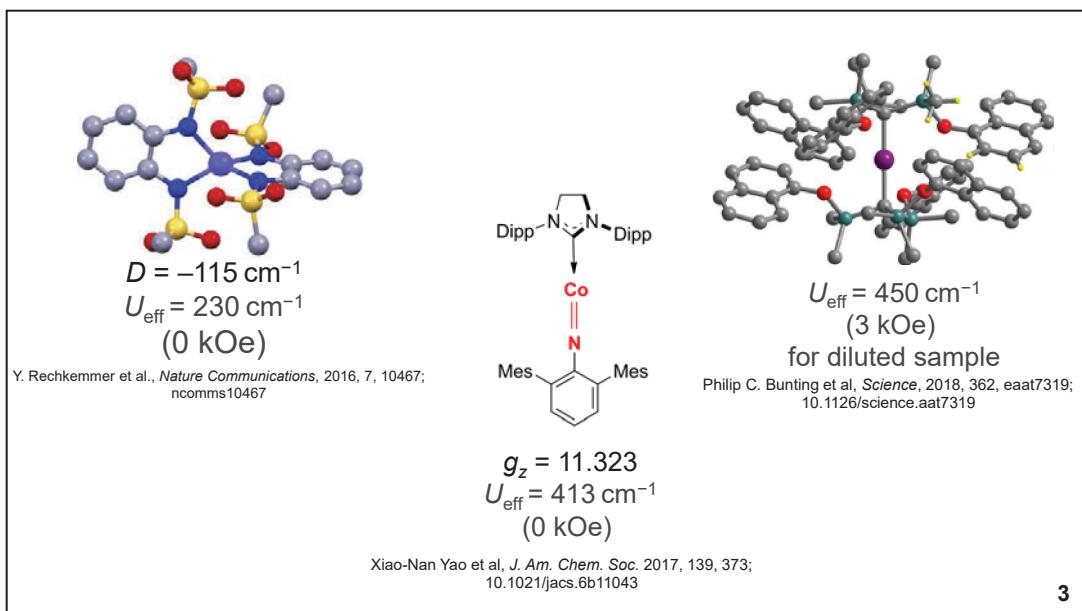


М.А. Кискин, И.Л. Еременко

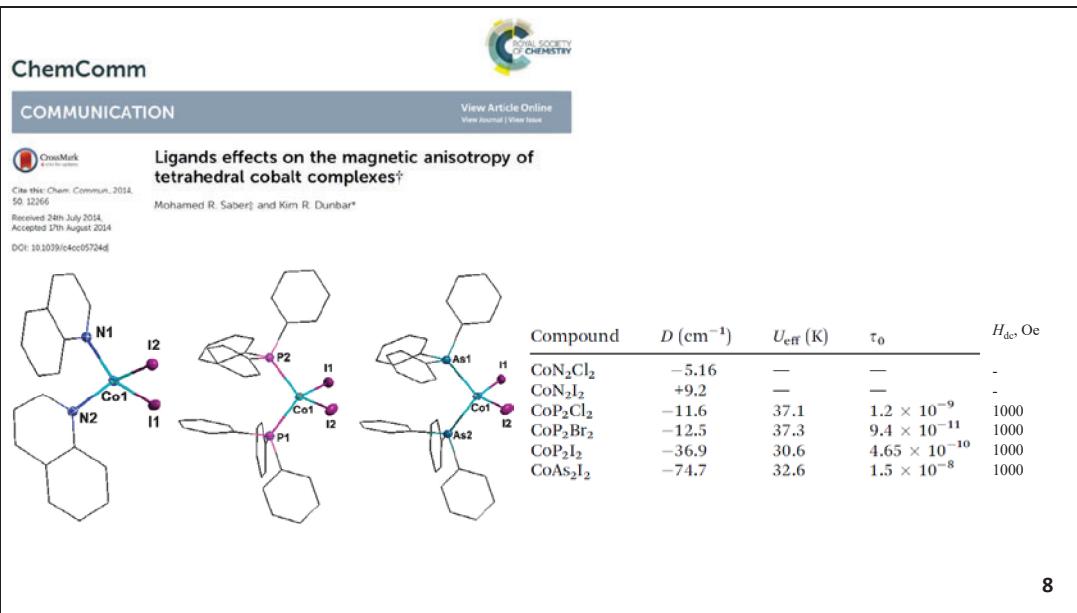
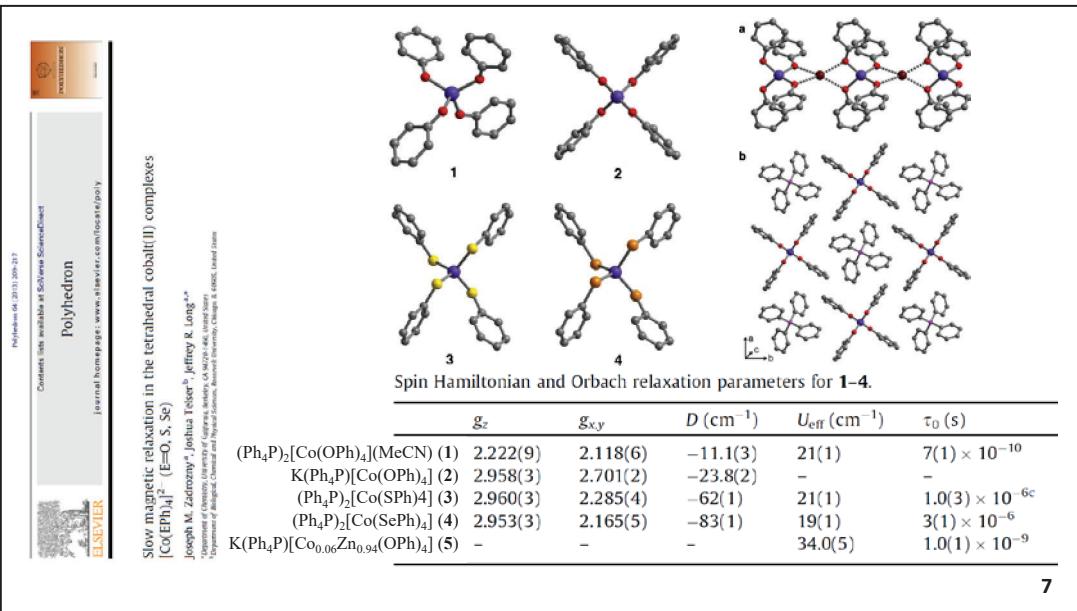
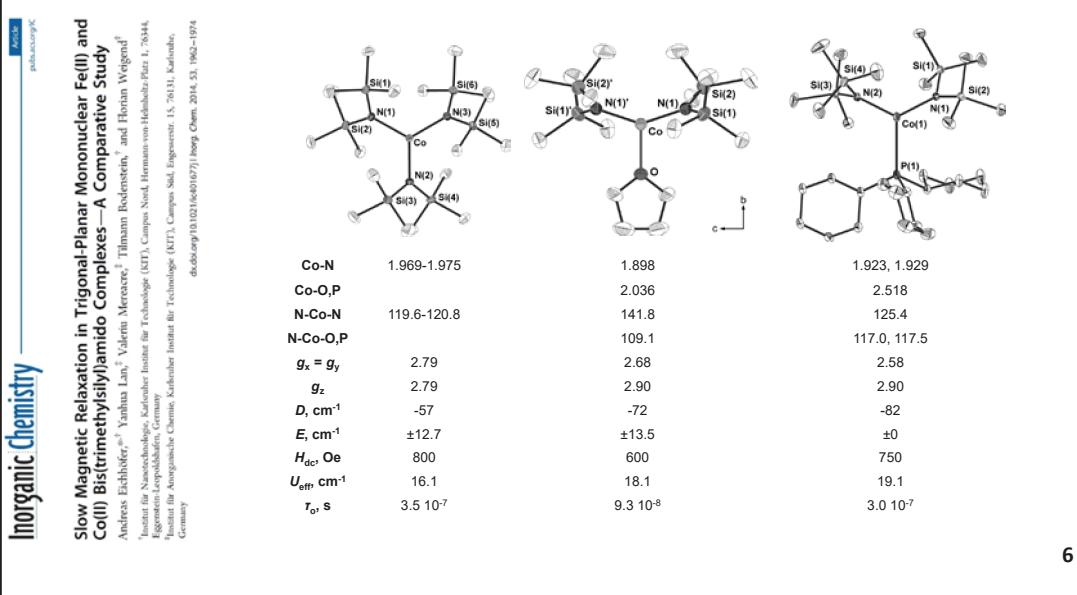
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова  
Российской академии наук

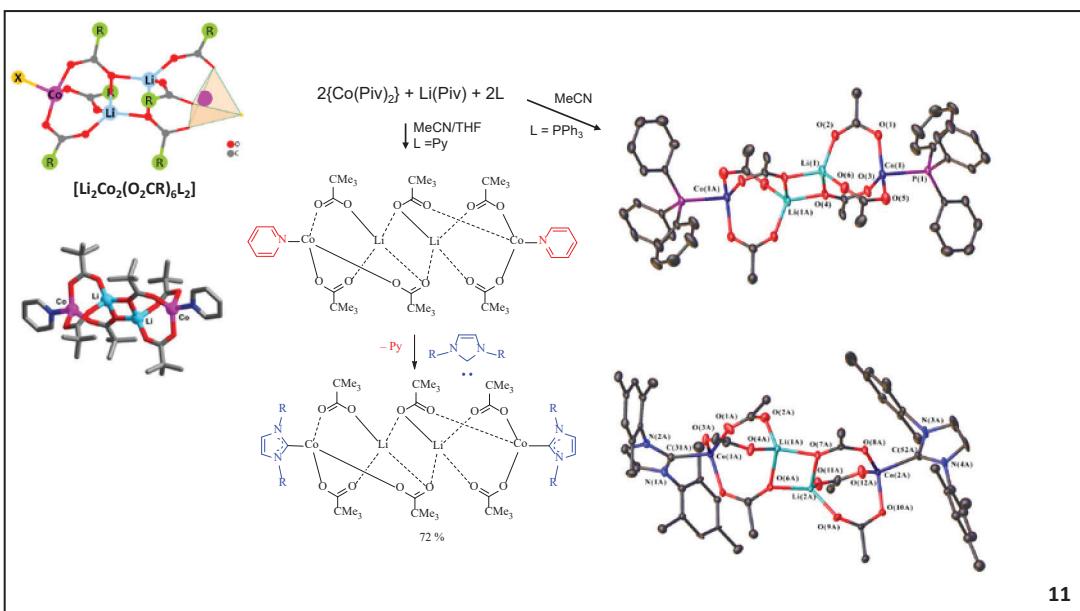
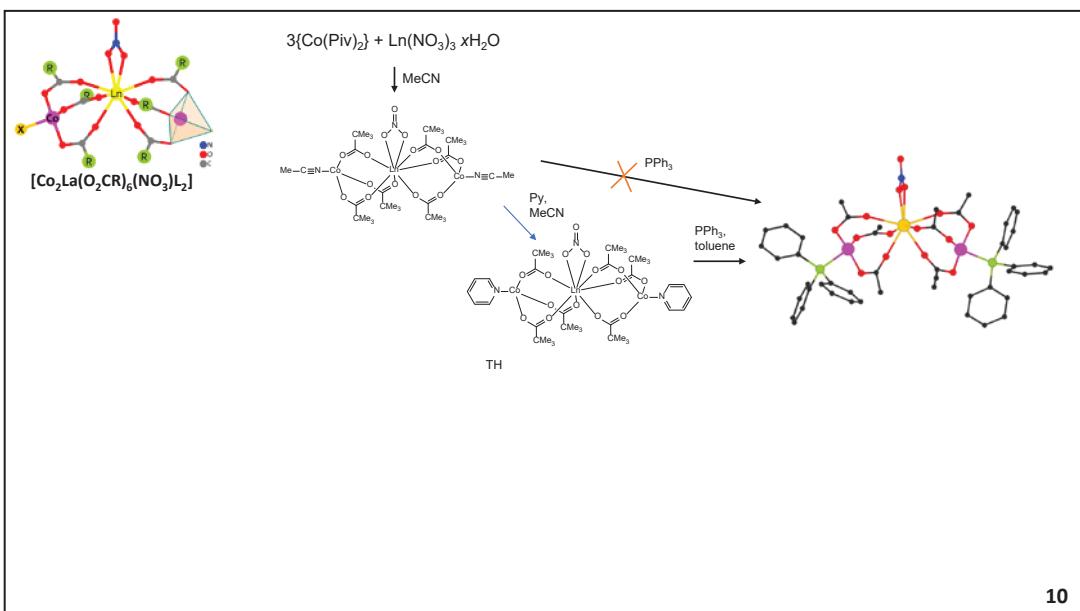
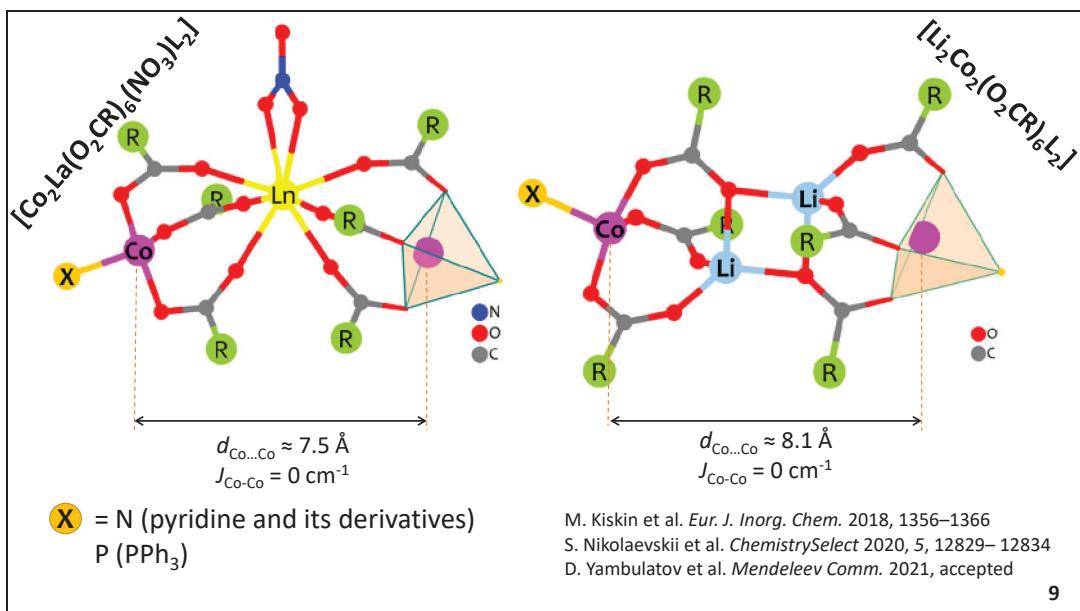
## КАРБОКСИЛАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ КОБАЛЬТА(II) КАК ПЛАТФОРМА ДЛЯ МОДИФИКАЦИИ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАГНИТОВ





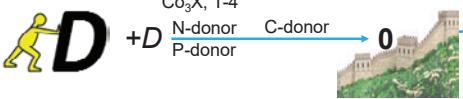
- ### Instruments for SIM/SMM:
- *design of metal complexes*, control of metal atom coordination environment to tune its magnetic anisotropy and long relaxation time
  - *magnetic dilution* to isolate metal centers/molecules (heterometallic complexes with diamagnetic 3d metal ions (Co(III), Zn(II)) – “molecular magnetic dilution”
- 5



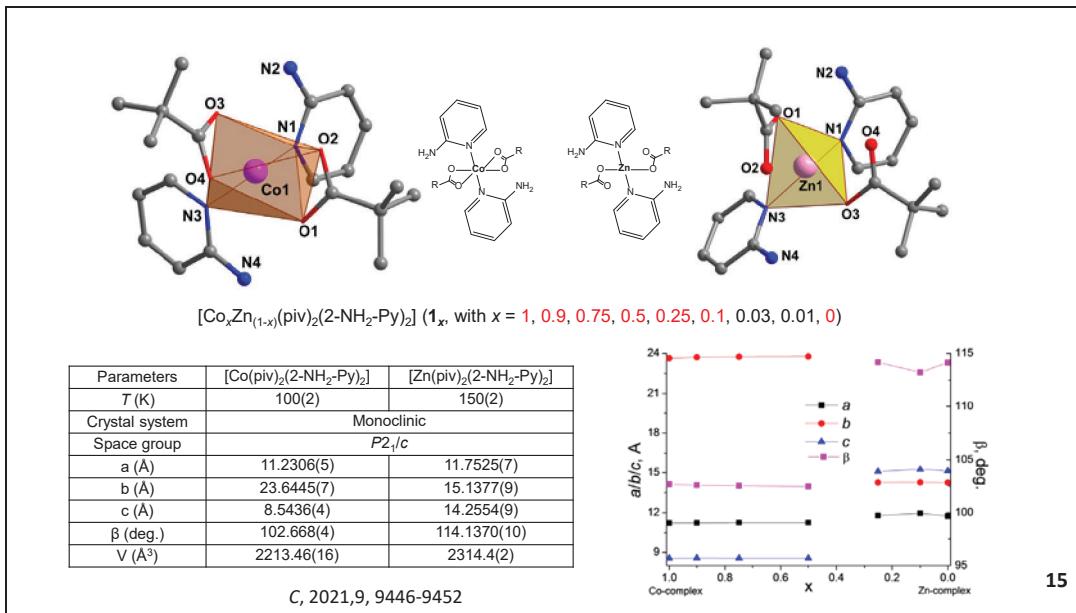
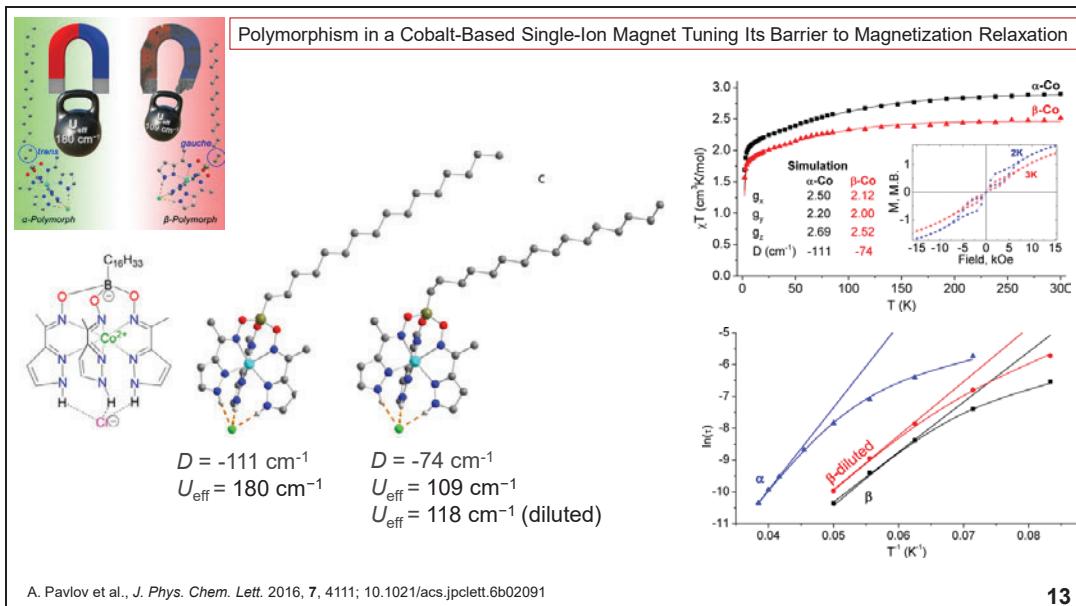


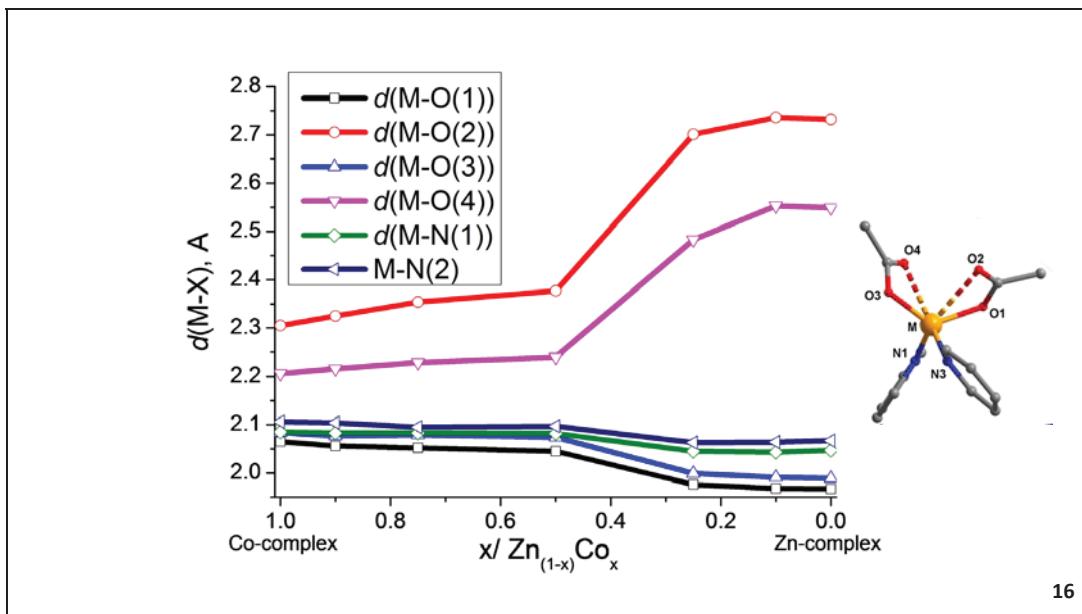
Metal core	{Co <sub>2</sub> La(O <sub>2</sub> CR) <sub>6</sub> (NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> }		{Li <sub>2</sub> Co <sub>2</sub> (O <sub>2</sub> CR) <sub>6</sub> }											
Ligand	MeCN	PPh <sub>3</sub>	Py	2,4-Lut		Py, O <sub>2</sub> CR = 2-furoat		PPh <sub>3</sub>		IMes				
Method	Approx. x <sup>1/2</sup> T	Approx. x <sup>1/2</sup> T	Calc.	Calc.	Approx. x <sup>1/2</sup> T	Calc.	Approx. x <sup>1/2</sup> T	Calc.	Approx. x <sup>1/2</sup> T	Calc.	Approx. x <sup>1/2</sup> T			
D <sub>1</sub> <sup>-1</sup> cm	28.0	23.5	+28.45	+28.82	13.2	+22.69	18.0	+28.82	20.5	+14.58 (Co1) +15.79 (Co2) +14.66 (Co3) +15.06 (Co4)	10.4			
E/D	-	-	0.248	0.248	-	0.097	-	0.138	-	0.201 (Co1) 0.189 (Co2) 0.179 (Co3) 0.302 (Co4)	-			
g <sub>x</sub>	2.37	2.329	2.431	2.344	-	2.320	-	2.344	-	2.297 (Co1) 2.301 (Co2) 2.294 (Co3) 2.325 (Co4)	-			
g <sub>y</sub>	2.37	2.329	2.274	2.255	-	2.270	-	2.255	-	2.228 (Co1) 2.239 (Co2) 2.234 (Co3) 2.228 (Co4)	-			
g <sub>z</sub>	2.00	2.00	2.082	2.044	-	2.090	-	2.044	-	2.133 (Co1) 2.130 (Co2) 2.134 (Co3) 2.137 (Co4)	-			
g <sub>iso</sub>			2.262	2.214	2.232	2.227	2.257	2.214	2.274	2.219 (Co1) 2.223 (Co2) 2.221 (Co3) 2.230 (Co4)	2.207			

Co<sub>3</sub>X, T=4

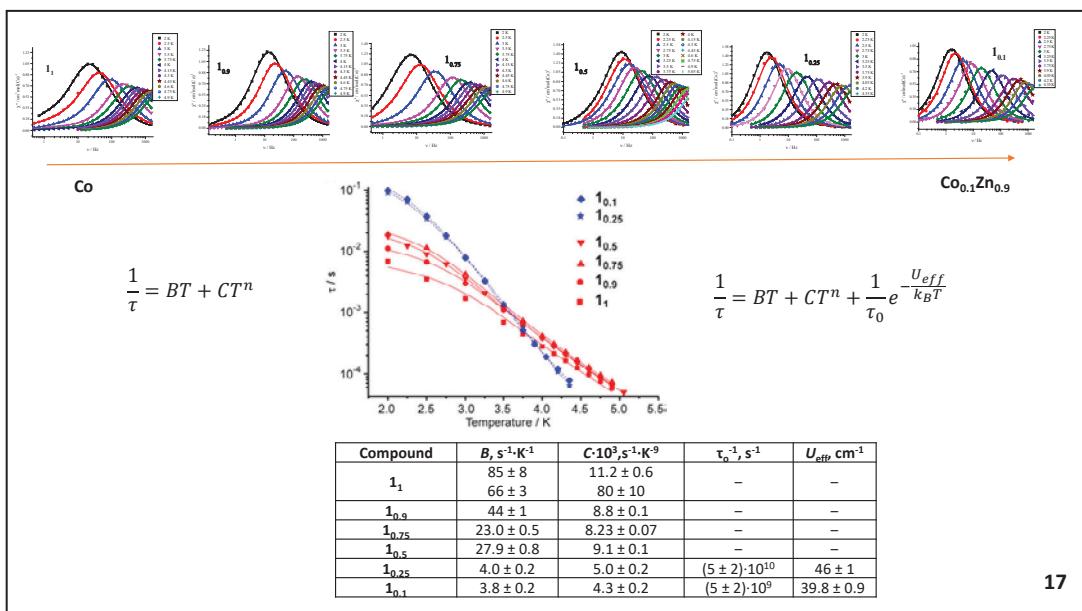


12

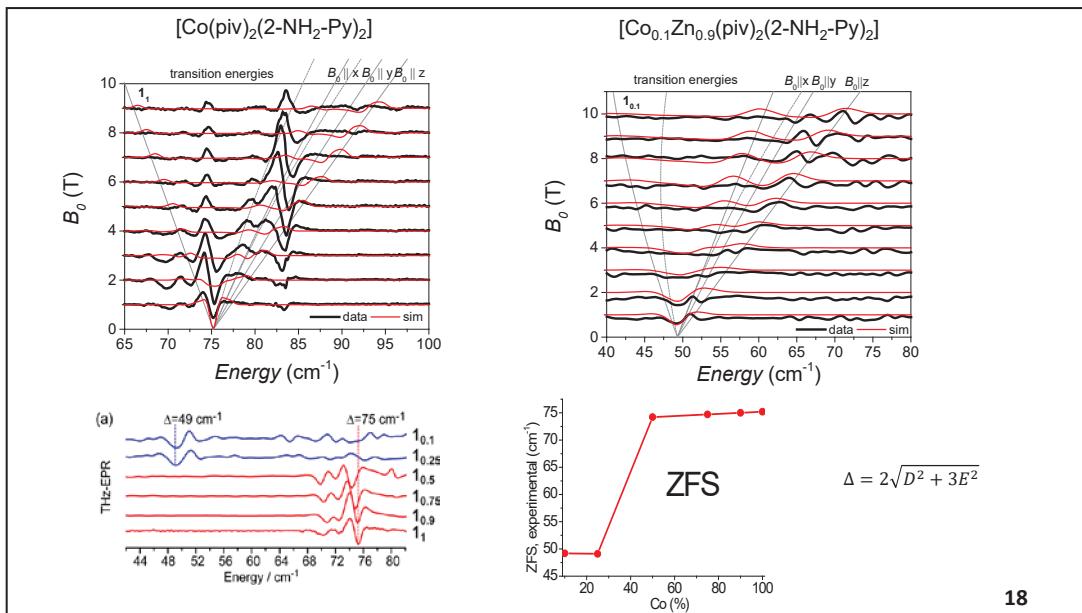




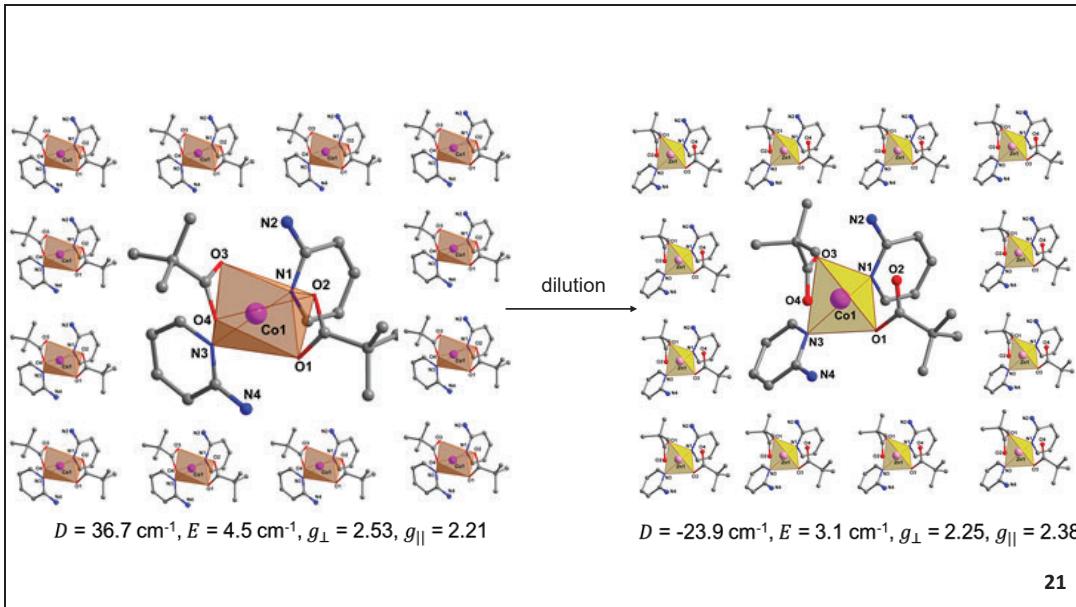
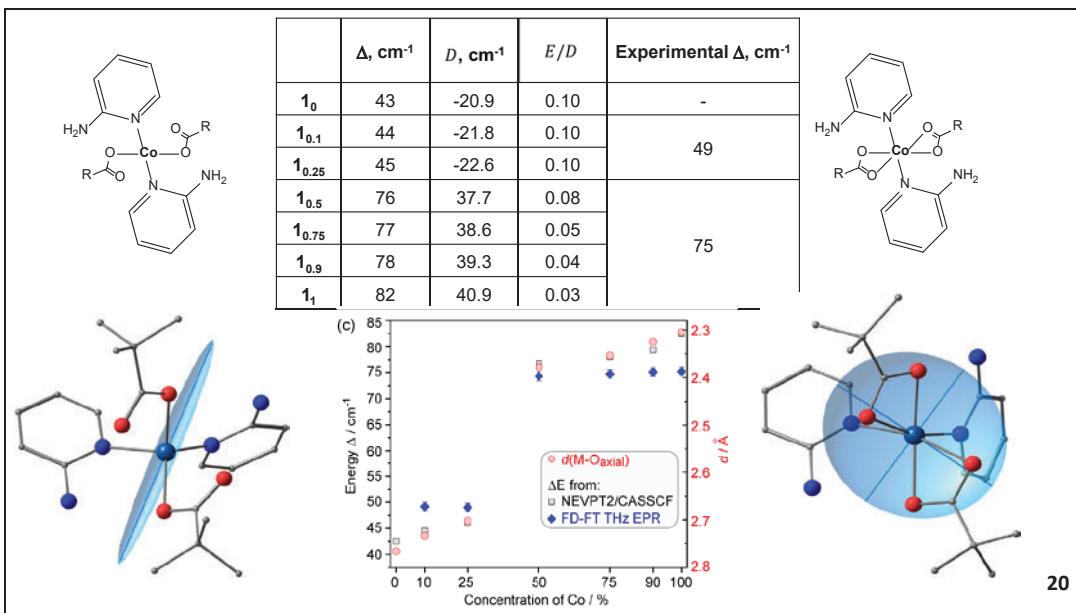
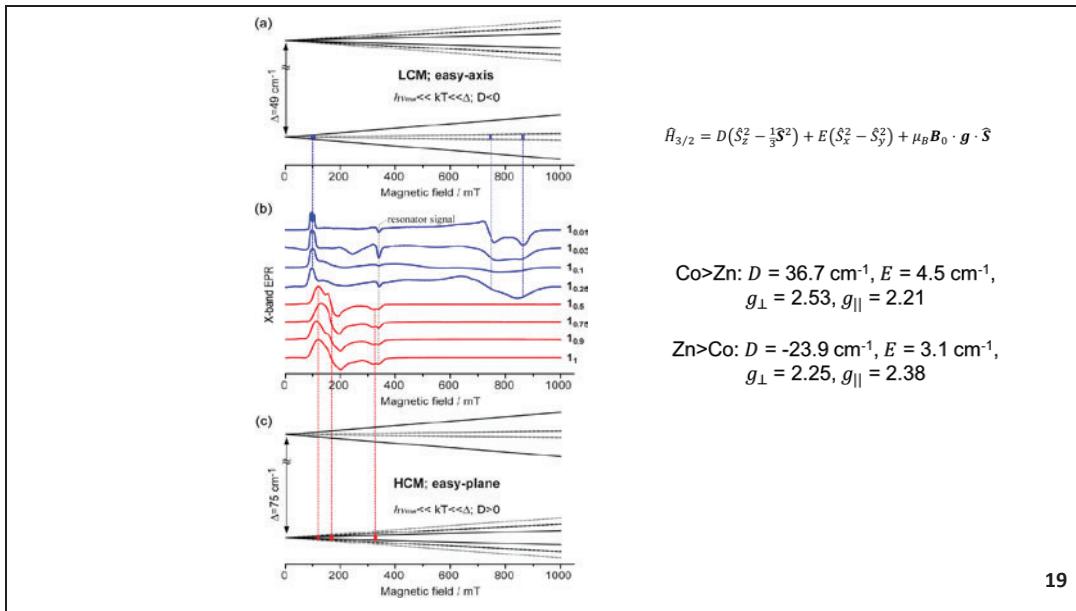
16



17



18



Презентация доклада д.ф.-м.н. Палия Андрей Владимировича,  
академика РАН Алдошина Сергея Михайловича,  
д.ф.-м.н. Цукерблата Бориса Самойловича  
«Квантовые клеточные автоматы на основе молекулярных ячеек:  
от молекулярной электроники к молекулярной спинtronике»

## Квантовые клеточные автоматы на основе молекулярных ячеек: от молекулярной электроники к молекулярной спинtronике

Палий А. В.<sup>1</sup>, Алдошин С. М.<sup>1</sup>, Цукерблат Б. С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт Проблем химической физики РАН,  
Черноголовка, Россия

<sup>2</sup> Университет имени Давида Бен-Гуриона в Негеве,  
Беэр-Шева, Израиль

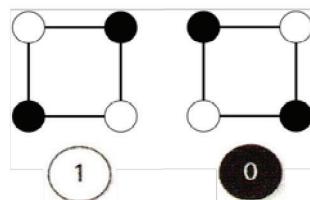
### Quantum cellular automata-a new paradigm

Quantum cellular automata (QCA):

□ A technology proposal based on arrays of coupled quantum dots

The main idea –to encode binary information in charge distributions  
and to transmit it via the Coulomb interaction between cells

QCA cell = four quantum  
dots + two excess electrons

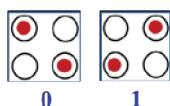


The cell charge “polarization” encodes the binary information:  
binary “1” and binary “0”

Lent, C. S.; Tougaw, P. D.; Porod, W.; Bernstein, G. H. *Nanotechnology* 1993, 4, 49–57.  
Lent, C. S.; Tougaw, P. D.; Porod, W. *Appl. Phys. Lett.* 1993, 62, 714-716.

### Schemes of QCA cell: from two cells to logic gates

**Scheme of QCA cell:** antipodal localization of electrons due to Coulomb repulsion



Binary “1” and “0” are encoded in the charge configurations

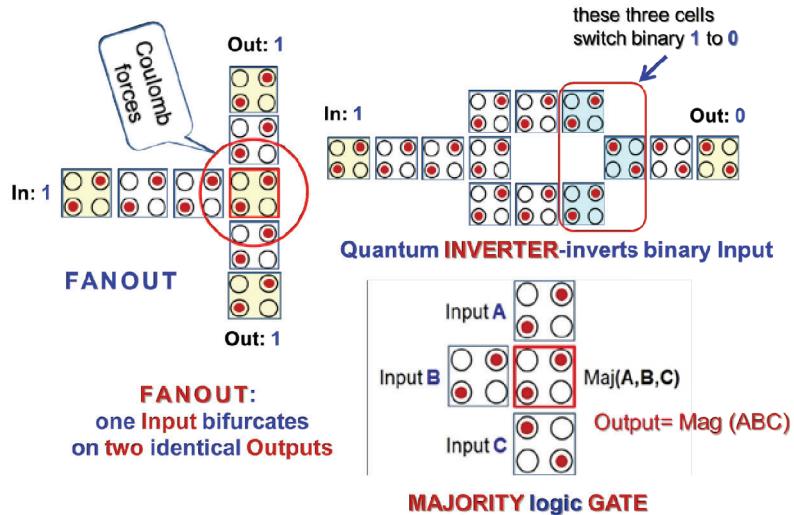
#### Charge configurations of two interacting cells

Electrons do not move from cell to cell, but the intercellular Coulomb interaction aligns the cells in the same state



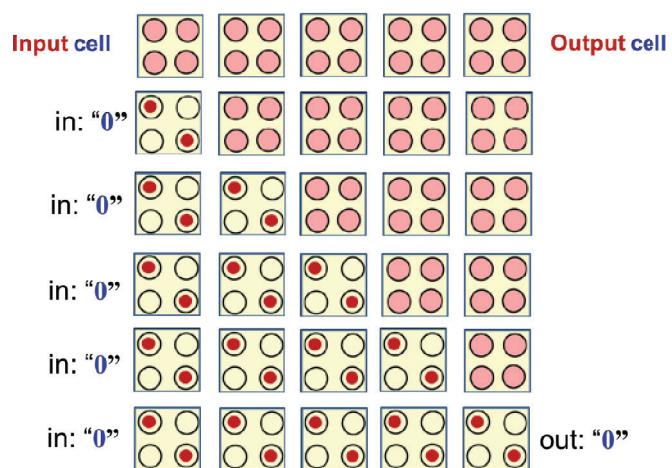
Minimum Coulomb repulsion      Maximum Coulomb repulsion

### Schemes of three key electronic devices

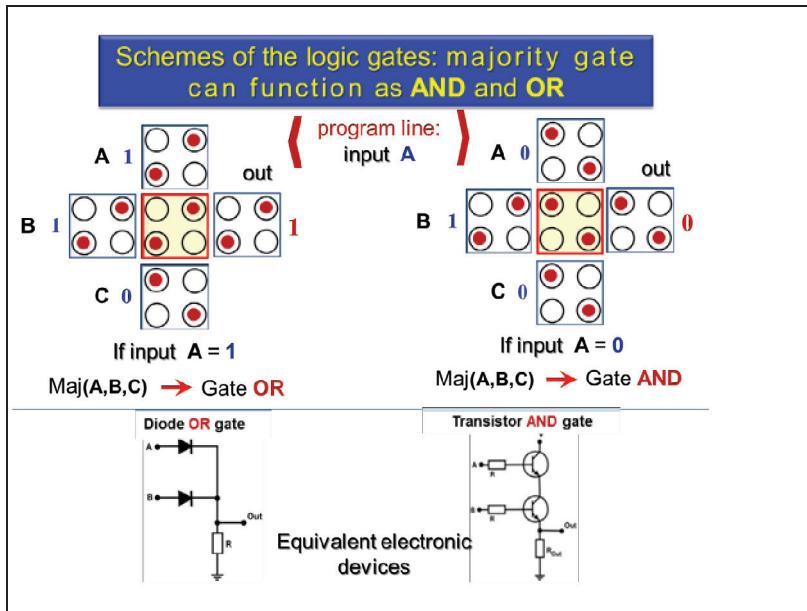


### Schemes of QCA cell and logic gates: QCA wires

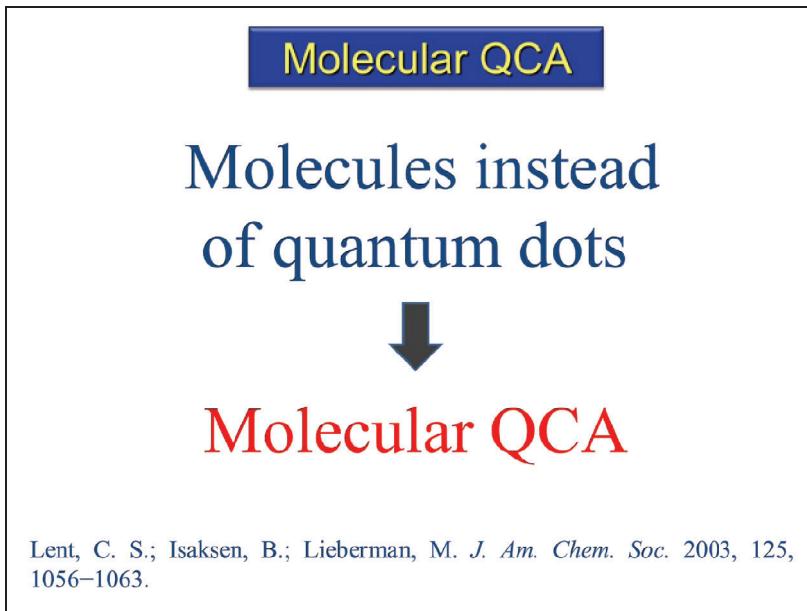
**QCA wire:** a linear array of cells, signal propagation



4



- Advantages of Quantum-Dot-Cellular-Automata in electronics
- ◆ Eliminates the need for current switches: binary information is encoded in charge distribution
  - ◆ Power gain, strongly reduced power dissipation and heating
  - ◆ Smaller size, high density of devices nature of the QCA
  - ◆ Computational pipeline can be achieved by the very nature of the QCA



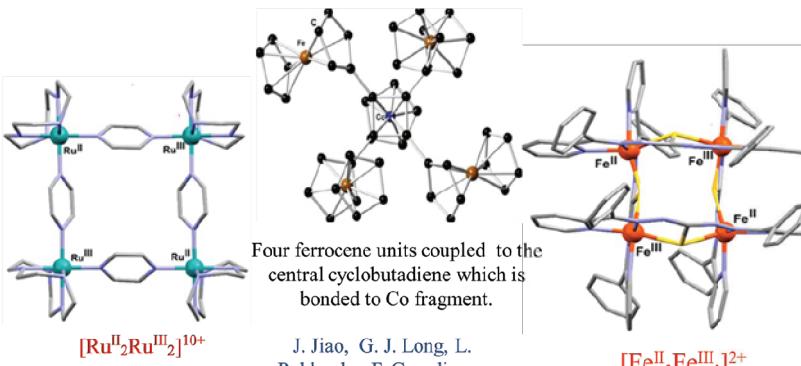
## Advantages of molecular systems as QCA cells

### Additional advantages of molecular systems as QCA cells:

- ★ Unlike quantum dots the molecular system of a **specified chemical composition** are absolutely identical and have ***identical physical characteristics***
- ★ By a chemical synthesis the **molecular clusters** can be **engineered to have the desired and controlled physical characteristics**
- ★ Molecules can be attached to **different types of platforms** by grafting individual clusters or monolayers on solid surfaces

9

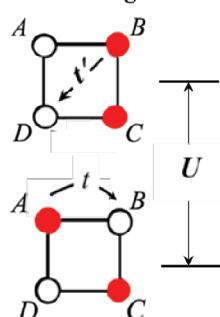
## Some proposals for molecular implementation of QCA



## Electronic model of the QCA cell

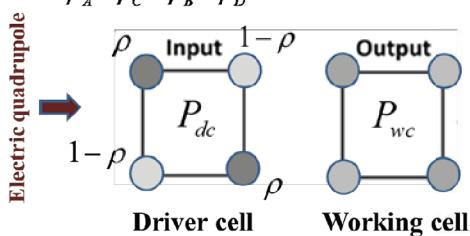
$$\hat{H}_C = \sum_{i>j} U_{ij} n_i n_j + \sum_{i>j} t_{ij} \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}^- + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}^-)$$

### Four configurations



### Two interacting cells

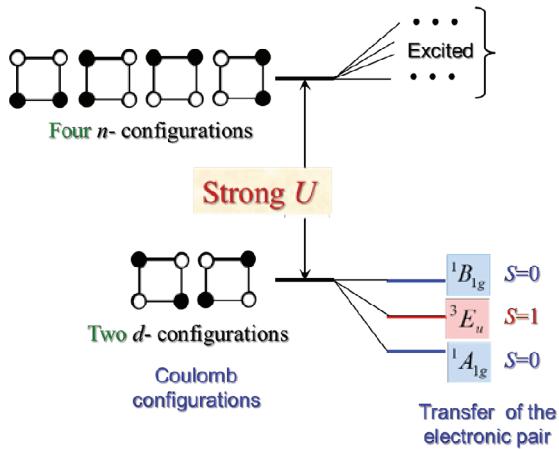
$$P = \frac{\rho_A + \rho_C - \rho_B - \rho_D}{\rho_A + \rho_C + \rho_B + \rho_D} - \text{cell polarization}$$



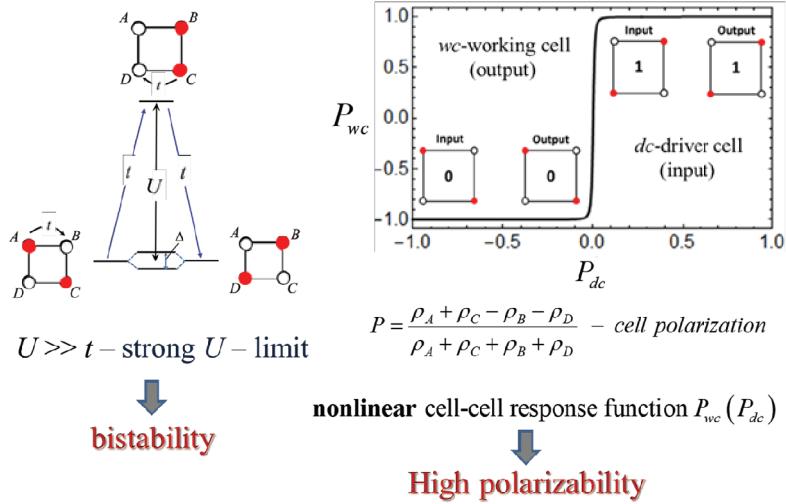
$P_{wc}(P_{dc})$ -cell-cell response function

### Energies of a tetrameric cell, ground manifold

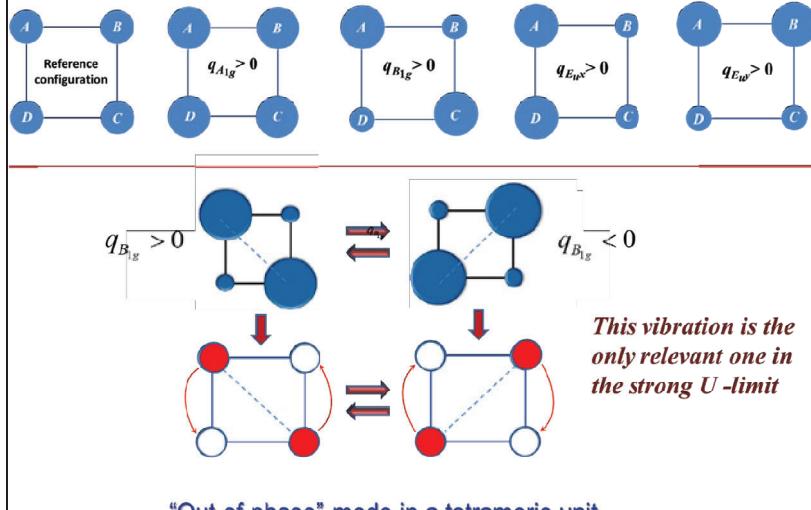
Low lying levels in the limit of strong Coulomb repulsion

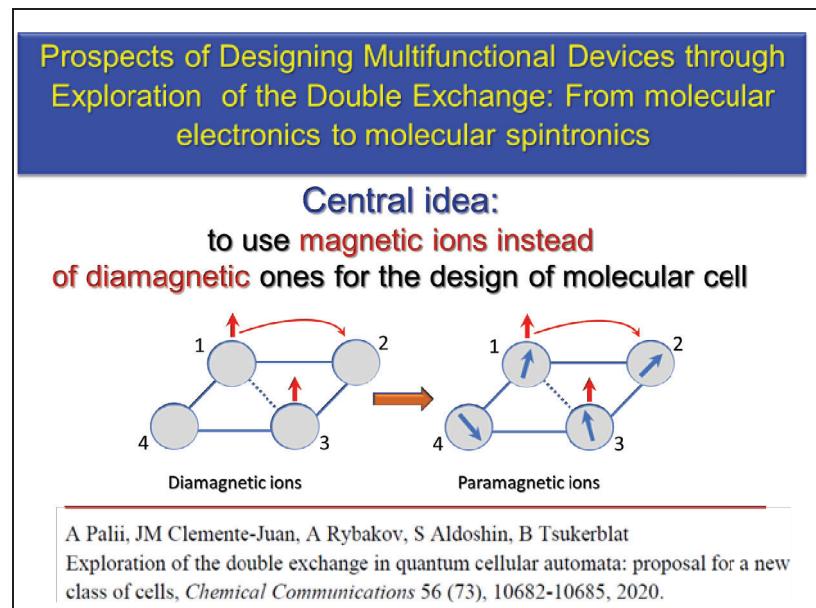
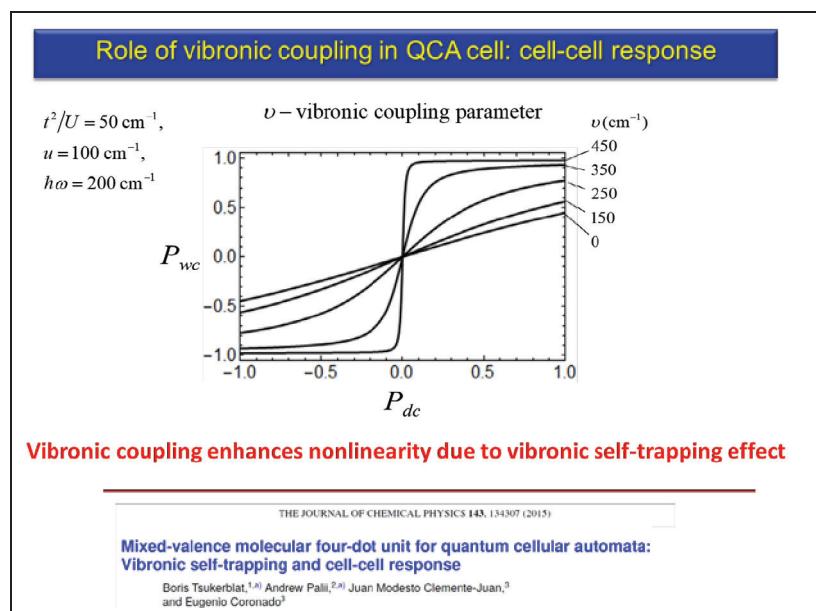
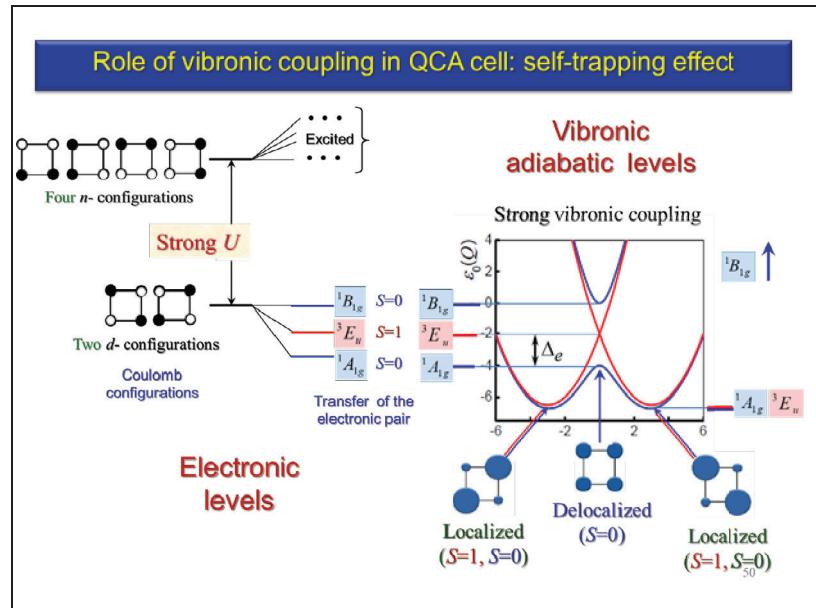


### Two main requirements – bistability and high polarizability

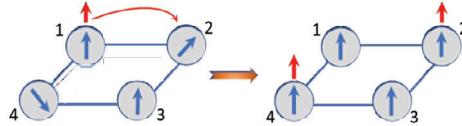


### Vibronic coupling: Symmetry adapted vibratioval coordinates

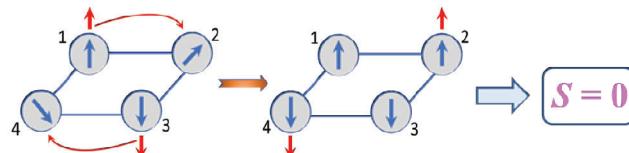




### Unusual antiferromagnetic double exchange in square planar cluster with two excess electrons

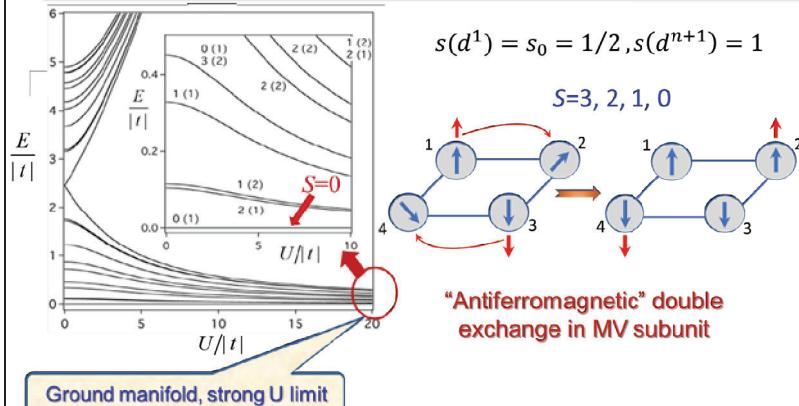


ferromagnetic spin alignment of localized spins in case of one delocalized electron – **ferromagnetic double exchange**



antiferromagnetic spin alignment of localized spins in case of two delocalized electrons – **antiferromagnetic double exchange**

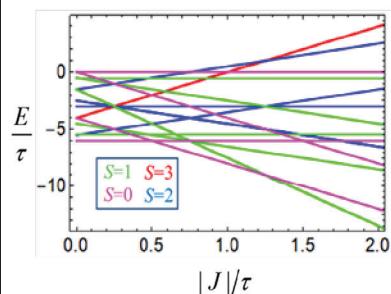
### Combined effect of double exchange and Coulomb repulsion in square-planar $d^2 - d^2 - d^1 - d^1$ - tetramer



MV tetramer is diamagnetic independently of the interrelation between the Coulomb repulsion and double exchange

20

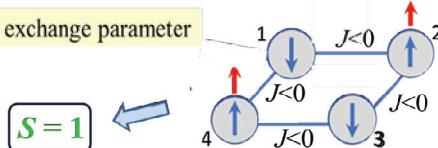
### Combined effect of the second order double exchange and HDVV exchange with $J < 0$ in $d^2 - d^2 - d^1 - d^1$ in the strong $U$ - limit



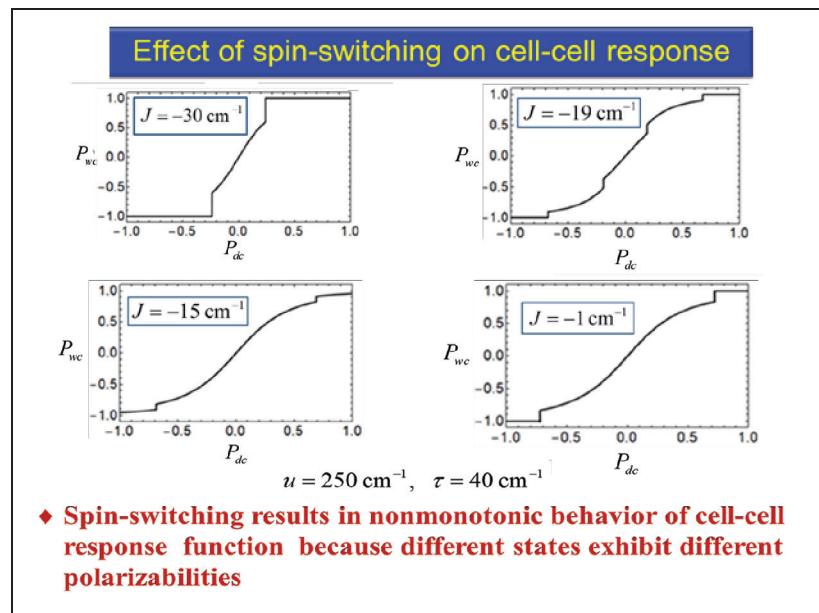
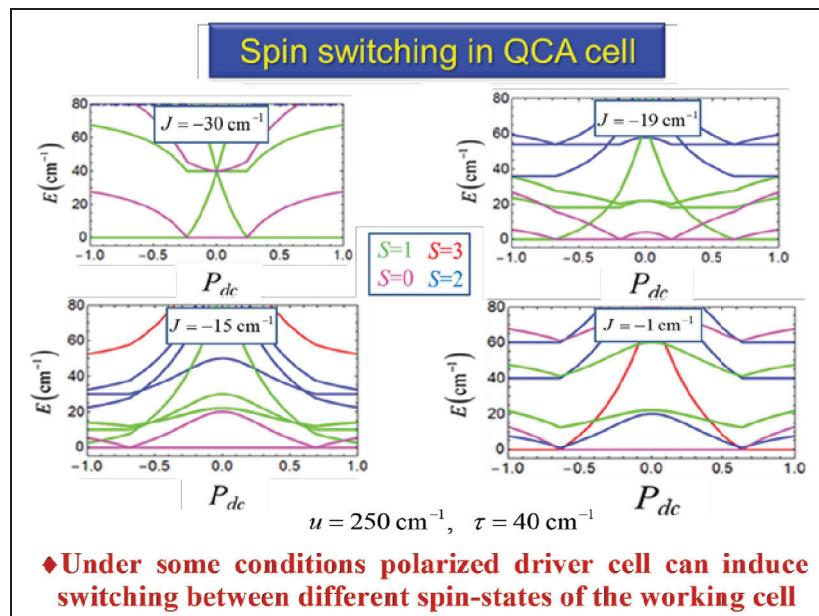
Correlation diagram for  $d^2 - d^2 - d^1 - d^1$ -tetramer within strong  $U$ -limit.

- In a strong  $U$  limit depending on the relative strength of the second order double exchange and HDVV exchange the ground state of the cell can be either spin triplet or one of the two spin-singlets

$\tau = t^2/U$  - effective double exchange parameter



$S = 1$



**Исследования молекулярных ККА в стране и в мире**

В мире

*Химический дизайн молекулярных ячеек на основе органических и неорганических комплексов смешанной валентности, создание сеточных молекулярных структур*

- ◆ University of Notre Dame, USA
- ◆ Dalian University of Technology, Dalian, China
- ◆ Louis Pasteur University, Strasbourg, France

*Квантово-химическое исследование молекулярных ячеек, разработка теоретических подходов, объединяющих квантово-химический анализ с полуфеноменологическими моделями*

- ◆ University of Minnesota, USA
- ◆ University of Manitoba, Winnipeg, Canada
- ◆ Università Roma, Italy

*Изучение механизмов диссипации энергии, экспериментальные исследования процессов диссипации в наноэлектронных устройствах*

- ◆ University of Notre Dame, USA

*Разработка логических устройств на основе ККА*

- ◆ University of Notre Dame, USA
- ◆ Department of Computer Science and Engineering of NIT Agartala, India

В России

*Разработка теоретических подходов и моделей для описания свойств ККА, квантово-химический дизайн молекулярных ячеек*

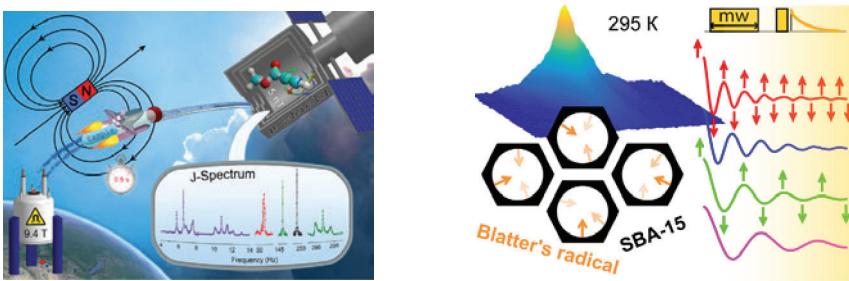
- ◆ Институт Проблем химической физики РАН

?????????????????

?????

Презентация доклада профессора РАН, д.ф.-м.н. Федина Матвея Владимировича и академика РАН Сагдеева Ренада Зиннуровича «Спины электронов и ядер для квантовых вычислений с использованием методов магнитного резонанса»

**Спины электронов и ядер  
для квантовых вычислений с использованием  
методов магнитного резонанса**



Проф. РАН Федин Матвей Владимирович  
Академик РАН Сагдеев Ренад Зиннурович  
+ коллеги

Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск



**Спины электронов и ядер для квантовых вычислений**

**Ключевые вызовы:**

- **Материалы** – поиск оптимальных кубитов и их масштабируемых массивов
- **Технологии** – алгоритмы квантовых вычислений и технические решения

**Материалы:**

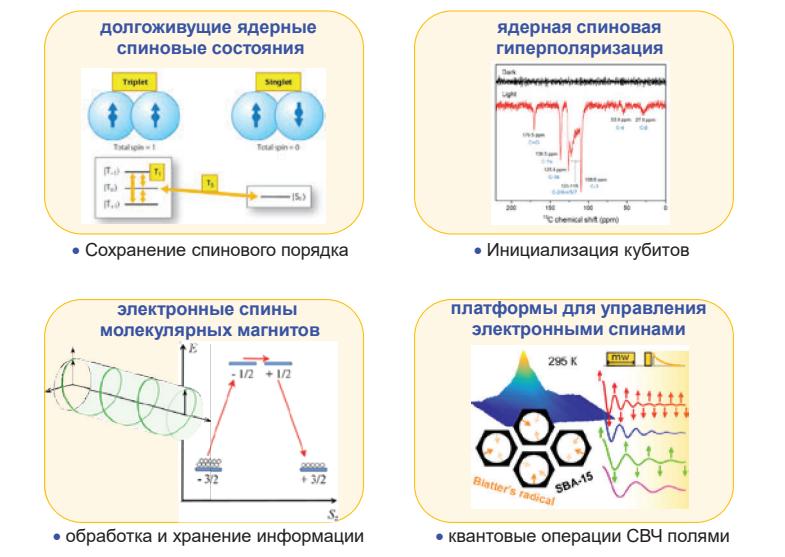
- «Базовые свойства» (стабильность, доступность, ...)
- Кубиты с длинными временами спиновой декогеренции
- Инициализация
- Масштабируемость
- Индивидуальная адресуемость
- Возможность манипулирования спиновыми состояниями (квантовые вентили)

**Технологии:**

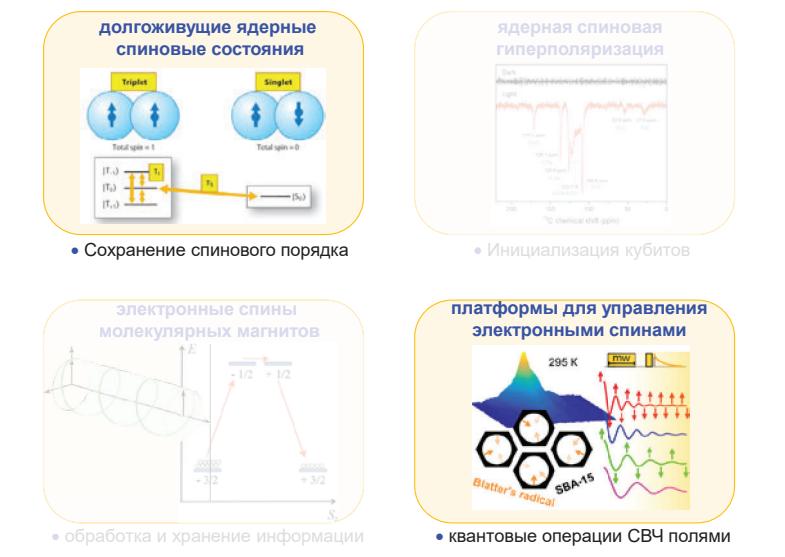
- Способы манипуляции спинами, построение вентилей, ...
- Алгоритмы вычислений и коррекции ошибок
- Оптимизация скорости вычислений

...

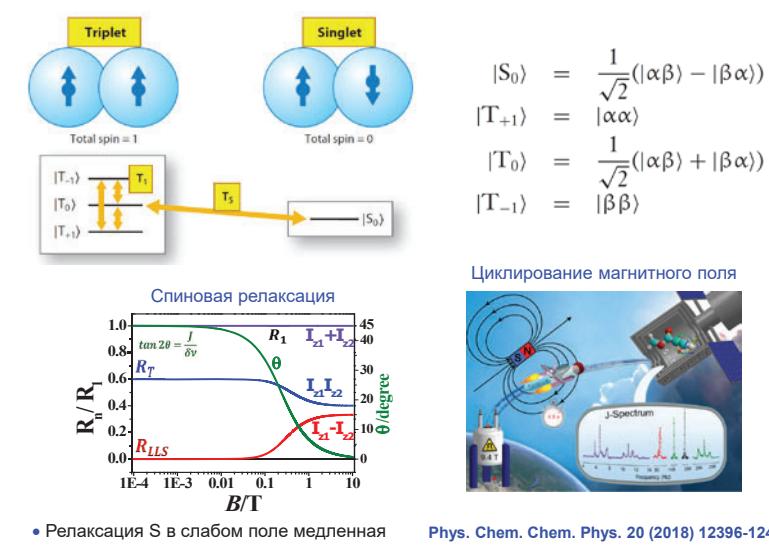
## Спины электронов и ядер для квантовых вычислений (МТЦ)



## Спины электронов и ядер для квантовых вычислений (МТЦ)

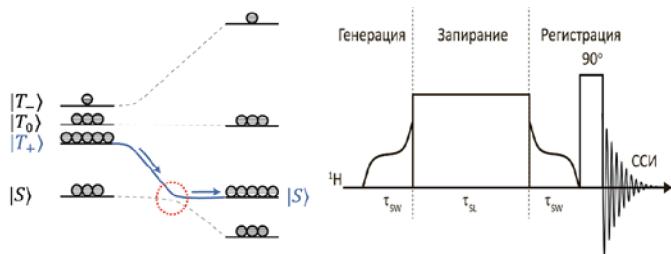


## Долгоживущие (синглетные) спиновые состояния в слабых полях



### Долгоживущие (синглетные) спиновые состояния в сильных полях

APSOC (Adiabatic Passage Spin Order Conversion) – использование РЧ полей

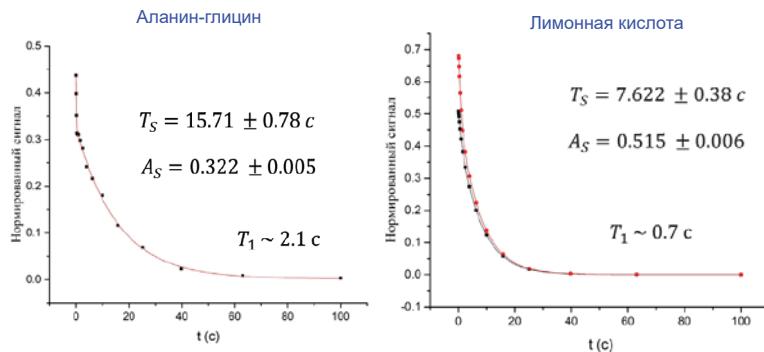


$$A(\tau_{SL}) = A_S \exp\left(-\frac{\tau_{SL}}{T_S}\right) + A_T \exp\left(-\frac{\tau_{SL}}{T_T}\right) + A_0$$

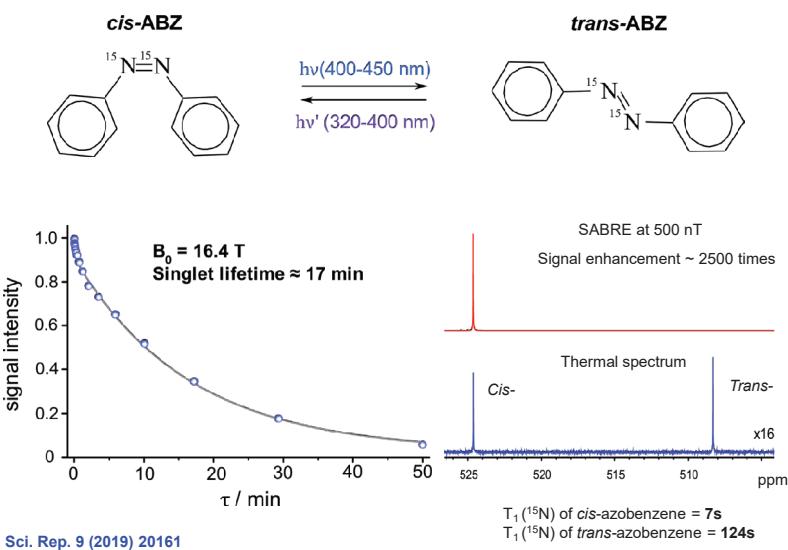


### Долгоживущие (синглетные) спиновые состояния: примеры

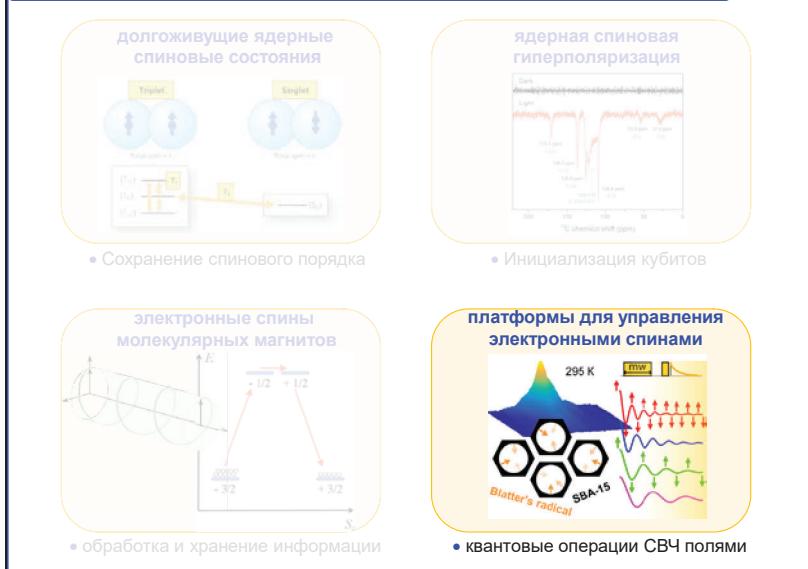
$$A(\tau_{SL}) = A_S \exp\left(-\frac{\tau_{SL}}{T_S}\right) + A_T \exp\left(-\frac{\tau_{SL}}{T_T}\right) + A_0$$



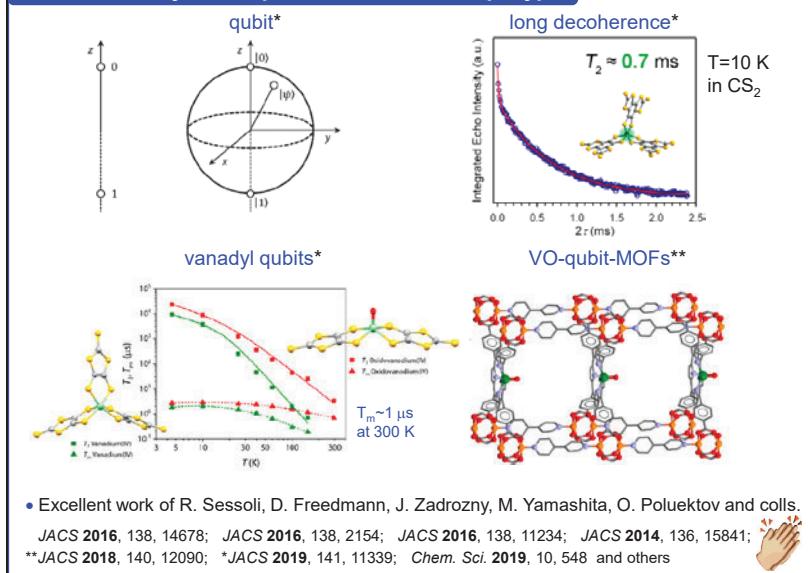
### Долгоживущие (синглетные) спиновые состояния в сильном поле



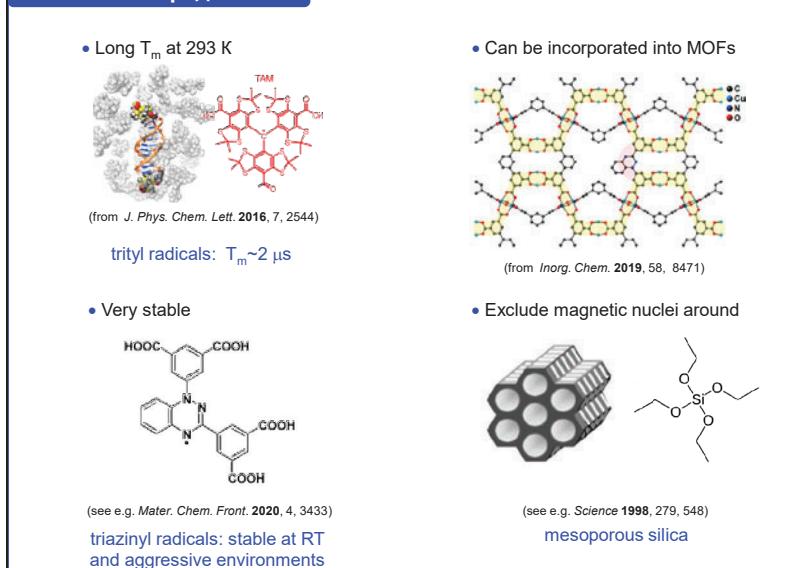
## Спины электронов и ядер для квантовых вычислений (МТЦ)



## Мотивация: кубиты при комнатной температуре

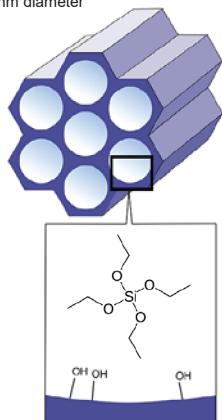


## Стабильные радикалы?



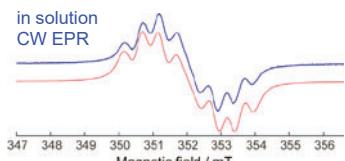
### Мезопористый материал SBA-15

~9.1 nm diameter

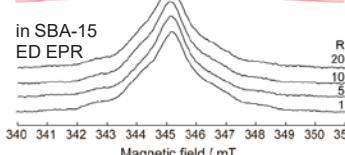
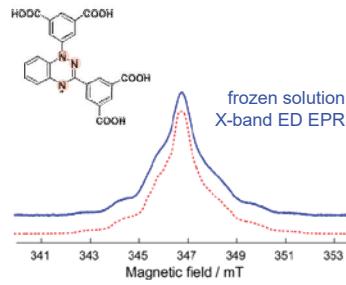
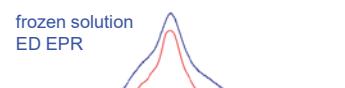


- SBA-15 is a well-known mesoporous silica material
- Functionalization using Blatter-type radical precursors; different loadings ( $R_{20}$ ,  $R_{10}$ ,  $R_5$ ,  $R_1$  and reference  $R_0$ )

### Спектроскопические свойства нанесенных радикалов



$$\bullet A_{\text{iso},1} = 0.75 \text{ mT}, A_{\text{iso},2} = A_{\text{iso},3} = 0.49 \text{ mT}$$

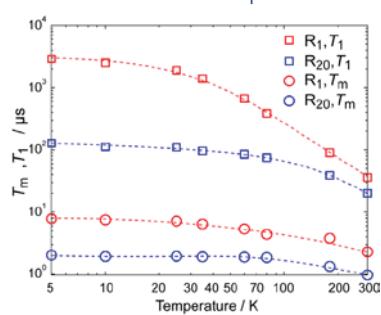


$$\bullet \text{Surprisingly, no anisotropic HFI/g data was available}$$

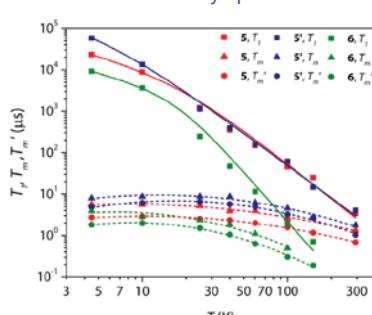
$$\bullet A_1 = [0.03 \ 0.22 \ 1.80] \text{ mT}, A_2 = A_3 = [0.01 \ 0.01 \ 1.38] \text{ mT}; g = [2.0043 \ 2.0035 \ 2.0015]$$

### Температурная зависимость времени релаксации

#### Blatter-radical qubits

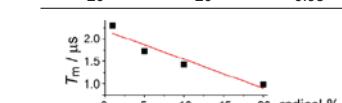


#### Vanadyl qubits



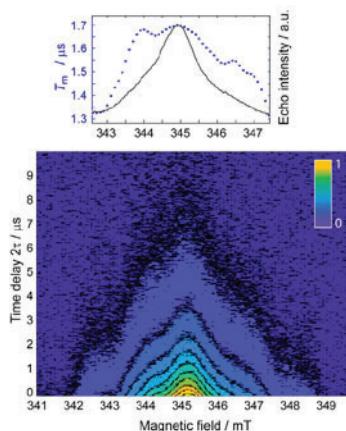
(from J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 11234)

- $T_m$  reaches ~2.3  $\mu\text{s}$  at 300 K for  $R_1$
- Record  $T_m \sim 1.04 \mu\text{s}$  at 300 K for vanadyl qubits
- Advantage at high (ambient) temperatures
- $T_m$  is not plateaued even for  $R_1$

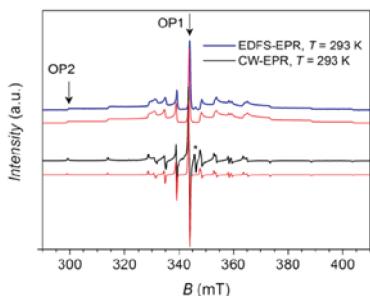


### Полевая зависимость времени декогеренции

Blatter-radical qubits



Vanadyl qubits



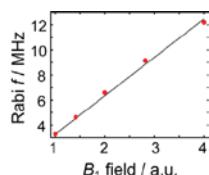
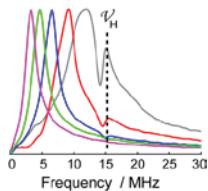
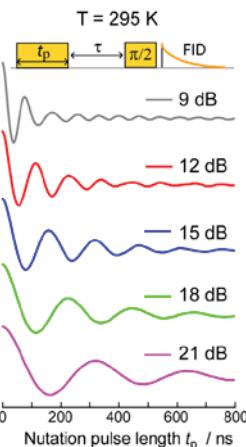
(from J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 11234)

OP1 = powder-like position

OP2 = single-crystal-like position

- No need to sacrifice sensitivity for the sake of  $T_m$  increase

### Управление спином при комнатной температуре



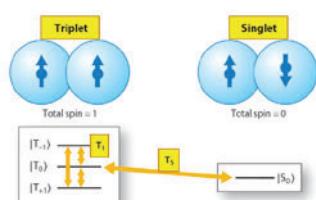
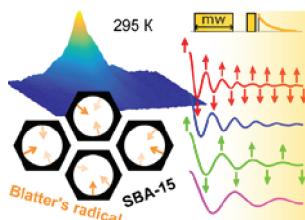
- Rabi oscillations are readily detected at room temperature
- simplest quantum manipulation experiment

Angew. Chem. Int. Ed. 60 (2021) 8683

### Заключение

#### Долгоживущие ядерные спиновые состояния:

- Возможность сохранения информации путем обратимой конверсии в долгоживущий синглетный спиновый порядок
- Разработаны подходы для управления
- Продемонстрированы примеры



#### Платформы для управления электронными спинами:

- Мезопористые кремниевые материалы с нанесенными радикалами → возможность квантовых операций при комнатной температуре
- Длительные времена декогеренции, подходящие спектроскопические параметры

## Спины электронов и ядер для квантовых вычислений

### Ключевые вызовы:

- **Материалы** – поиск оптимальных кубитов и их масштабируемых массивов
- **Технологии** – алгоритмы квантовых вычислений и технические решения

### Материалы:

- ✓ • «Базовые свойства» (стабильность, доступность, ...)
- ✓ • Кубиты с длинными временами спиновой декогеренции
- ✓ • Инициализация
- ✓ • Масштабируемость
- ✓ • Индивидуальная адресуемость
- ✓ • Возможность манипулирования спиновыми состояниями (квантовые вентили)

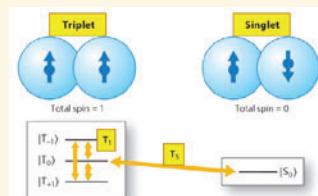
### Технологии:

- Способы манипуляции спинами, построение вентилей, ...
- Алгоритмы вычислений и коррекции ошибок
- Оптимизация скорости вычислений

...

## Благодарности

### долгоживущие ядерные спиновые состояния



К.х.н. А.С. Порываев

К.х.н. Д.М. Полюхов

Dr. Eva Gjuzi (Uni Hamburg)

Dr. Frank Hoffmann (Uni Hamburg)

Prof. Michael Fröba (Uni Hamburg)

Академик Р.З. Сагдеев

Проф. РАН К.Л. Иванов

Д.ф.-м.н. А.В. Юрковская

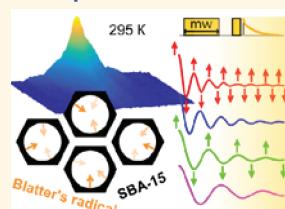
К.х.н. А.С. Кирютин

Б.А. Родин

К.Ф. Шеберстов.

Н.-М. Vieth

### платформы для управления электронными спинами



Спасибо за внимание!!!

## 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 2021 г. . . . .	9
Результаты, полученные в 2021 г. по направлению работы Научного совета РАН по материалам и наноматериалам .....	65
Приложения .. . . . .	105

## ДЛЯ ЗАМЕТОК

---

## ДЛЯ ЗАМЕТОК

---

## ДЛЯ ЗАМЕТОК

---

ОТЧЕТ  
О РАБОТЕ НАУЧНОГО СОИ  
ПО МАТЕРИАЛАМ И НАНОМА-