Материаловедение и науки о Земле

Роман Васин

ЛНФ ОИЯИ, 22.11.2022

Материалы



Преимущества (дифракции нейтронов)

- Измерение объёмных образцов (образцы с линейными размерами несколько см, gauge volume внутри объёма образца)
- Часто не требуется специальная подготовка образца (уникальные материалы, культурное наследие)
- Отличное разрешение и симметричная форма пиков при использовании TOF фурье-дифрактометрии (распределение кристаллитов по форме/размеру, типы дислокаций, дефекты упаковки, ...).
- Магнитный момент (core-shell модели магнитных наночастиц, магнитные текстуры)
- Чувствительность к водороду, изотопам



S.V. Sumnikov et al. (2022). J. Alloys Compd., 10.1016/j.jallcom.2022.167116

Материалы для... еды: варим рисовую лапшу

C(t) [µs⁻¹]

M. Witek et al. (2021) Polymers 10.3390/polym13152426

т

Ŧ

80

momentum

distribution

10

5

15

20

Η

«Контроль качества» замороженной или сублимированной еды. 1.0 т ж T. ж 2.0x10⁸ 60, 80°C 1.8x10⁸ intensity [a.u.] 1.6x10⁸ 1.4x10⁸ 1.2x10⁸ 0.0 -20 20 40 60 0 1.0x10⁸ 0.5 1.0 1.5 2.5 3.0 2.0 T [°C] d spacing [Å] 3.5 0.08 1.0 Al 60°C, 60°C, resolution 3.0 () backscatt. 0.8 forward 0.06 2.5 6.0 C(t) [hs-1 0.4 С [¥] (Å)f 2.0 1.5 Η 1.0 0.02 0.2 0.5 0.00 0.0 0.0 275 325 350 375 300 350 -10 -5 200 250 400 -20 300 425 -15 0 400 150 y [Å⁻¹] TOF [µS] TOF [µs]

Структура костей, импланты, срастание...



G.E. Bacon (1990) Proc. Roy. Soc. B, 10.1098/rspb.1990.0042 R. Ahmed et al. (2011) J. Mech. Behav. Biomed., 10.1016/j.jmbbm.2011.07.003

Структура костей, импланты, срастание...



Самоминерализующиеся резорбируемые мембраны: добавка полиакриловой кислоты с высоким молекулярным весом.



J. Li et al. (2021) Acta Biomater., 10.1016/j.actbio.2021.02.012



E. Törnquist et al. (2021) Phys. Med. Biol., 10.1088/1361-6560/ac02d4



0%

Объём костяной ткани вблизи импланта: Ctrl = контрольная группа Trtd = получили золедроновую кислоту + костный морфогенетический белок 2

Динамика гидроксиапатита: сжигаем бедренную кость



Duplex stainless steels (DSSs)

Феррит + аустенит; превосходная прочность и устойчивость к агрессивным средам (химическая, нефтегазовая промышленность, энергетика, ...).





- Разные механизмы охрупчивания в зависимости от Т?
- Фазовый переход в феррите при высоких Т: спинодальный распад или ОРЗ?

X. Xu et al. (2019) Mater. Sci. Eng. A 10.1016/j.msea.2019.03.046

Спинодальный распад в Мп-Си

Демпфирующие свойства, эффект памяти формы, отличная прочность, пластичность



f.c.t.

f.c.c.

f.c.t.

3.0

L. Sun et al. (2021). J. Alloys Compd., 10.1016/j.jallcom.2020.157061

MnCu и NiMnGa сплавы



Super duplex stainless steels (SDSSs)

Изучение механизма водородного охрупчивания



Циркониевые сплавы

a)

ODF Intensity [m.r.d] 10 10

---- E

CANDU pressure tubes, Zr+2.5%Nb:

- an extrusion step at ~ 800 C; 1)
- air cooling down to room temperature; 2)
- 3) cold-pilgenrolling;-30% reduction);
- a final thermal treatment (autoclaving) 4) at 400 C for 24 h.

⁶⁰Ф 30



F. Malamud et al. (2018) J. Nucler. Mater., 10.1016/j.jnucmat.2018.08.003

Front

Back

«Библейские» монеты





S.E. Nagler et al. (2019) J. Anal. Methods Chem., 10.1155/2019/6164058

Магнитная память металла

«Магнитная память металла» - эффект «памяти» деформации металла, заключающийся в возникновении высокой намагниченности металла в магнитном поле Земли в зонах больших деформаций, обусловленных действием механических нагрузок и появлением ориентированных внутренних напряжений (А.А. Дубов, 1994). Используется как метод неразрушающего контроля состояния конструкций.



Сплавы с памятью формы

NiTi – великолепные термомехамические свойства и биосовместимость. Высокие Т?





A. Shuitcev et al. (2022). J. Alloys Compd., 10.1016/j.jallcom.2021.163322

Высокопластичные А1 сплавы

Субмикронные зёрна с широкими малоугловыми границами: высокая прочность и пластичность.



M.R. Joo et al. (2023). J. Alloys Compd, 10.1016/j.jallcom.2022.167868

Аддитивные технологии (металлы, сплавы)

Pros:

- Можно изготавливать материал исключительно сложной геометрии.
- Минимизация отходов производства.

Cons:

- о Специфическая микроструктура и форма зёрен.
- Нужен контроль остаточных напряжений, дефектов, пор.
- о Низкая усталостная прочность.

Material	AM Technology
Ti6Al4V/TiC (From 0% to 50% Ti [147]	LMD
TA15/TiC (From 0% to 50% TiC) [148]	LMD
Ti6Al4V/TiC (From 0% to 30% Ti) [149]	DED
Ti6A14V/SS304 L/V [150]	DED
TiAl4V/Invar (From Ti6Al4V to pure Invar with 3% increment) [151]	DED
Ti6Al4V / Mo (From Ti6Al4V to pure Mo with 25% increment) [152]	DED
Ti6Al4V/Al ₂ O ₃ [153]	LENS
SS AISI316L [154]	SLM
SS 316L/Stellite12 with few millimeter transition zone [155]	LDM
SS 316L/P21 with 25/50/75% graded layers [156]	DED
SS 316L/P21 + 316L SS/P21 [123]	DED
SS430 + SS316 [140]	LENS
AlSi10Mg + C18400 [143]	SLM
316L SS + IN 718 [141]	L-PBF
CS 45 and CS/MS [142]	L-PBF
SS 304 [142]	L-PBF
Fe/Al-12Si [144]	SLM

- Laser Metal Deposition
- Direct Energy Deposition
- Laser Engineered Net Shaping
- Selective Laser Melting
- Laser-Powder Bed Fusion

S. Hasanov (2021). J. Manuf. Mater. Process, 10.3390/jmmp6010004



L. Nickels (2018). Metal Powder Report, 10.1016/j.mprp.2018.03.050

Аддитивные технологии (металлы, сплавы)

Порошок стали 304L (< 45 мкм), L-PBF в атмосфере аргона.



Метаматериалы





N. I. Zheludev (2010). Science, doi:10.1126/science.1186756

M. Kadic et al. (2019). Nature Reviews Physics, 10.1038/s42254-018-0018-y

Метаматериалы

- Электромагнитные и оптические (отрицательный показатель преломления, «идеальное поглощение», хиральные эффекты, нелинейные эффекты, гиперболические материалы, ...)
- Акустические и механические (отрицательный объёмный модуль, отрицательная плотность, ауксетики, self-aware композиты, ...)
- Транспортные (анизотропная диффузия, электро- и теплопроводность, ...)
- + возможно управлять поведением метаматериалов внешними воздействиями



Антенны, плащи-невидимки, демпферы, всевозможные датчики, фильтры, волноводы...

M. Kadic et al. (2019). Nature Reviews Physics. 10.1038/s42254-018-0018-y

Метаматериалы



Самозалечивающиеся материалы

Полимеры, керамики, бетон, металлы, электродные материалы...



Альфа-вольтаические элементы

Импланты, космические миссии, ...



Органические солнечные батареи

Лёгкие, удобные, полупрозрачные, потенциально дешёвые, ... Оптимизация? Стабильность?



K.S. Wienhold et al. (2020). Appl. Phys. Lett. 10.1063/5.0003997

Электродные материалы (Li-ion, Na-ion, K-ion, ...)



Высокоэнтропийные сплавы

Твердость, жаропрочность, коррозионная стойкость, стабильность, пластичность...



In situ нейтронная дифракция, размер зёрен ≈ 6 мкм



Основной режим пластической деформации?



D. Wei et al. (2022) Int. J. Plasticity, 10.1016/j.ijplas.2022.103417

Образцы-свидетели для теста Шарпи

18MND5 steel, non-irradiated







G. Bokuchava & P. Petrov (2020) Metals, 10.3390/met10050632

CaO-MgO-Al₂O₃-SiO₂ (CMAS) стёкла



K. Gong et al. (2021). Phys. Rev. Materials, 10.1103/PhysRevMaterials.5.015603

Структура минералов: позиции водорода

G. Diego Gatta et al. (2022) American Mineralogist, 10.2138/am-2022-8086

Пробертит, CaNa[$B_5O_7(OH)_4$]·3 H_2O , минеральное сырьё В ($B_2O_3 \sim 50$ wt%), Kramer Deposit (Kern County, California, USA).



N. Precisvalle et al. (2021) Scientific Reports, 10.1038/s41598-021-82045-2

 Φ тор-дефицитный голубой топаз $Al_2SiO_4(F,OH)_2$, Padre Paraíso (Minas Gerais, Brazil)





Н при высоких Р; полевые шпаты; цеолиты...

Связь магнитной структуры и микроструктуры: гётит (α-FeOOH)



Преимущественные ориентировки минералов









H.-R. Wenk et al. (2019) Minerals, 10.3390/min9050277 R. Keppler et al. (2021) Solid Earth, 10.5194/se-12-2303-2021 H.-R. Wenk et al. (2022) J. Struct. Geol. 10.1016/j.jsg.2022.104730



Преимущественные ориентировки минералов

Покров Адула, Альпы (а) 32 образца, в основном гнейсы



R. Keppler et al. (2021) Solid Earth, 10.5194/se-12-2303-2021 R.N. Vasin et al. (2017) Geophys. J. Int. 10.1093/gji/ggw487

Water uptake into fractured rocks

The fluid permeability of rocks is important for waste storage, oil and gas extraction, models of seismic zones.



The water uptake into fracture was very fast: 2-3 cm per second. It is due to the combination of capillary rise of water within the fracture and spreading over the rough surfaces of the fracture faces (water rise through rough surface is preferred compared to the smooth surface!).

C.-L. Cheng et al. (2015). Advances in Water Resources 77, 82-89.

Определение пористости сланцев



H. Zhan et al. (2022) Fractal Fract., 10.3390/fractalfract6090484

Сейсмичность и трещинообразование в горных породах







120

140

160

200

0,0

-400

-600

180

-200 Instrain

——confining pressure/MPa ——pore pressure /MPa



J. Abe et al. (2018) Physica B, 10.1016/j.physb.2018.01.062 G. Gudehus et al. (2022) Acta Geotechnica, 10.1007/s11440-022-01513-9

Осталось за кадром

- Водородная энергетика
- Экология
- Материалы для катализа
- Фармацевтика
- ✓ In situ синтез, кристаллизация/рекристаллизация
- Аэрогели

V ...

- ✔ Композиты (например, металлы, армированные стекловолокном)
- Металлоорганические каркасы
- Металлические стёкла
- Бетоны/цементы
- ✓ Эмфанизис (материалы с локальным нарушением симметрии при нагреве)
- ✓ Data-driven analysis

Резюме

- Практически все методики рассеяния нейтронов используются для исследований функциональных, «умных», конструкционных, биоматериалов, ... и готовых изделий. Огромное количество задач в самых различных областях!
- Перспективы на 20 лет аддитивные технологии, метаматериалы, высокоэнтропийные сплавы,...
- Геофизические применения в основном дифракция (структура, текстура, механические напряжения), радиография/томография, МУРН, ...
- Измерение большого количества образцов, *in situ* измерения, уменьшение gauge volume для «локальных» измерений (pinhole diffraction, ≈ 250 мкм), исследования микроструктуры → требуется увеличение потока
- Измерение деформаций, искажений структуры требуется улучшение разрешения
- Интересны оптимизация структуры/микроструктуры, процесса производства, эксплуатационных характеристик в разных условиях. Новые материалы, процессы, свойства? Требуются «сложные» системы окружения образца (магнитное поле + нагрев + нагрузка + ... + оптимизация для многодетекторной конфигурации спектрометра), чтобы быть готовыми к их изучению!

Резюме

- Временной фактор для некоторых экспериментов фиксирован (in situ нагрев/охлаждение, заряд/разряд, циклирование нагрузки с постоянной скоростью), поэтому желательно некоторое «дублирование» функций инструментов.
- Комбинирование методов (дифракция + МУРН, дифракция + томография/радиография, дифракция + неупругое рассеяние) встречается относительно редко, хотя выглядит перспективно! По-видимому, связано с инструментами и привычками исследователей...
- Эксперименты по полному рассеянию и глубоко неупругому рассеянию требуют горячего источника (~ 2500 К)
- Больше объём информации усовершенствование методов обработки данных и моделирования
- Нужны <u>люди!</u>

Спасибо за внимание!