## ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

## МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии»

11–14 сентября 2023 г. Томск, Россия

УДК 539.216 539.22 538.91-405 620.18 ББК Г 534 Т29

**Т29** Тезисы докладов Международной конференции «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии», 11-14 сентября 2023 года, Томск, Россия. — 676 с.

Издание содержит тезисы международной конференции «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии». Физическая мезомеханика является научным направлением, в рамках которого материал представляется как иерархическая система взаимосвязанных структурных (масштабных) уровней. В книге отражены последние достижения в области развития принципов и методологии физической мезомеханики и результаты их применения к созданию перспективных материалов в интересах развития новых производственных технологий, освоения космического пространства, в том числе дальнего космоса, электроники, атомной энергетики, нефтегазового комплекса, медицины, транспорта и др. Книга адресована научным сотрудникам, инженерам, аспирантам и специалистам, занимающимся вопросами физической мезомеханики, разработки наноструктурных объемных и наноразмерных материалов, наноструктурированием поверхностных слоев, тонкими пленками и покрытиями, нанотехнологиями, компьютерным конструированием новых материалов и технологий их получения, технологиями локальной нестационарной металлургии и обработки материалов, неразрушающими методами контроля.

Публикуется в авторской редакции.

УДК 539.216 539.22 538.91-405 620.18 ББК Г 534

© Институт физики прочности и материаловедения CO PAH, 2023

## КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН АМОРФНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ С ТРЕБУЕМЫМИ МЕХАНИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ

Галимзянов Б.Н., Доронина М.А., Мокшин А.В. Казанский федеральный университет, Казань

Аморфные металлические сплавы являются перспективными материалами для автомобильной, аэрокосмической, энергетической, электронной и медицинской техники. Высокая коррозионная стойкость, высокая магнитная проницаемость, превосходная механическая прочность и высокий предел упругой деформации - это лишь некоторые из уникального набора свойств, которые делают аморфные металлические сплавы широко применимыми [1]. Синтез аморфного металлического сплава с заданными механическими свойствами может потребовать составления списка различных комбинаций составов с последующим механическим испытанием. Это делает процесс синтеза новых сплавов чрезвычайно сложным и значительно увеличивает расходы.

В последние десятилетия бурное развитие информационных технологий, а также автоматизация процессов сбора и хранения данных способствовали накоплению и систематизации информации о физико-механических свойствах аморфных металлических сплавов различного состава. Для обработки этих данных наиболее часто привлекаются методы машинного обучения, которые оперируют большими массивами данных и позволяют определять взаимосвязь между составом и свойствами сплавов как уже известных, так и не известных ранее [2].

В настоящей работе предлагается новый метод определения аморфных металлических сплавов произвольного состава на основе большого набора эмпирических данных. Оригинальность этого метода заключается в том, что в его основе лежит модель искусственного интеллекта, способная прогнозировать модуль Юнга и предел текучести аморфных сплавов с учетом фундаментальных свойств каждого химического элемента, входящего в состав сплавов. Было рассмотрено более 50 000 аморфных сплавов разного состава, для них были оценены модуль Юнга и предел текучести с помощью модели искусственного интеллекта, обученной на фундаментальных физических свойствах химических элементов [3]. Статистическая обработка полученных результатов показывает, что наиболее значимыми факторами являются фундаментальные физические свойства химического элемента с наибольшей массовой долей. Показано, что значения модуля Юнга и предела текучести выше для аморфных сплавов на основе Cr, Fe, Co, Ni, Nb, Mo и W, полученных добавками полуметаллов, неметаллов и лантаноидов, чем для сплавов других составов. Увеличение количества компонентов в сплаве от двух до семи и изменение массовой доли химических элементов не оказывает существенного влияния на прочностные характеристики. Выявлены аморфные сплавы с наиболее улучшенными механическими свойствами. Полученные результаты приводят к новым знаниям, которые будут способствовать определению аморфных металлических сплавов, максимально удовлетворяющих требуемым механическим свойствам.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 19-12-00022).

<sup>1.</sup> Kruzic J.J. Bulk Metallic Glasses as Structural Materials: A Review // Adv. Eng. Mater. – 2016. – Vol. 18. – P. 1308–1331. – DOI: 10.1002/adem.201600066.

<sup>2.</sup> Xiong J., Shi S.-Q., Zhang T.-Y. A machine-learning approach to predicting and understanding the properties of amorphous metallic alloys // Mater. Des. – 2020. – Vol. 187. – P. 108378. – DOI: 10.1016/j.matdes.2019.108378.

<sup>3.</sup> Galimzyanov B.N., Doronina M.A., Mokshin A.V. Neural Network as a Tool for Design of Amorphous Metal Alloys with Desired Elastoplastic Properties // Metals. – 2023. – Vol. 13. – P. 812. – DOI: 10.3390/met13040812.