Материаловедение в машиностроении Materials science in mechanical engineering

Наукоёмкие технологии в машиностроении. 2024. №12 (162). C.25-30. Science intensive technologies in mechanical engineering. 2024. №12 (162). P.25-30.

Научная статья УДК 666.798.2

doi: 10.30987/2223-4608-2024-25-30

Получение кермета в режиме горения инфильтрацией расплава Cu + Ti в пористый карбид титана

Евгений Иванович Латухин¹, к.т.н. Людмила Александровна Кондратьева², д.т.н. ^{1, 2} Самарский государственный технический университет, Самара, Россия ¹ evgelat@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-2071-3521 ² schiglou@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-3940-9511

Аннотация. Приведены результаты исследований по взаимодействию горячего пористого каркаса из карбида титана, полученного в режиме самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, с расплавом медь-титан. Исследования проводились на образцах двух видов: без предварительного нагрева и с предварительным нагревом перед синтезом в печи до температуры 300 °C. Образцы представляли собой плоские спрессованные таблетки, состоящие из двух разных по составу слоев. Нижним слоем была шихта из Ті и С, а верхним слоем смесь из Ті и Си. Процесс синтеза образцов проводился на воздухе. После прохождения реакции в нижнем слое образцов и образования пористого каркаса из карбида титана, в обоих образцах верхний слой расплавлялся и без остатка впитывался в нижний слой. Рентгенофазовый анализ центральной части образца показал наличие трех фаз — ТіС, Си и СиЗТі. Установлено, что полученный композит представлял собой пористый каркас из ТіС, пропитанный сплавом меди и титана. Зёрна карбида титана имели в большей степени нестехиометрический состав и представляли собой многогранные частицы среднего размера 20 мкм, а также частицы стехиометрического состава размером не более 10 мкм. На поверхности части ТіС, в виде тонкой пленки на отдельных участках был обнаружен интерметаллид. Кроме этого, было установлено, что предварительное нагревание исходного образца в печи до 300 °C перед синтезом позволяет повысить содержание стехиометрического карбида титана в полученном кермете.

Ключевые слова: карбид титана, медь, интерметаллид, композиционный материал, самораспространяющийся высокотемпературный синтез, инфильтрация

Для цитирования: Латухин Е.И., Кондратьева Л.А. Получение кермета в режиме горения инфильтрацией расплава Cu + Ti в пористый карбид титана // Наукоёмкие технологии в машиностроении. 2024. № 12 (162). C. 25–30. doi: 10.30987/2223-4608-2024-25-30

Production of cermet in a combustion mode by means of infiltration of Cu + Ti melt into porous titanium carbide

Evgeny I. Latukhin ¹. PhD. Eng. Lyudmila A. Kondratieva ². D. Eng. ^{1,2} Samara State Technical University, Samara, Russia ¹ evgelat@yandex.ru ² schiglou@yandex.ru

Abstract. Results for the interaction of a hot porous titanium carbide frame obtained in the mode of self-propagating high-temperature synthesis with a copper-titanium melt, are presented. The studies were carried out using two types of samples: without and with preheating up to 300 °C before synthesis in a furnace. The samples were flat compressed tabs of stock material consisting of two layers with different composition. The lower layer was Ti and C stock, and the upper layer was a mixture of Ti and Cu. The process of sample synthesis was carried out in air. After the reaction took place in the lower layer of the samples and the formation of a porous titanium carbide frame, in both samples the upper layer melted and was absorbed into the lower layer unreservedly. X-ray phase analysis of the central part of the sample showed the presence of three phases — Ti, Cu and Cu3Ti. It was found that the resulting composite was a porous TiC frame impregnated with an alloy of copper and titanium. Titanium carbide grains had a largely non-stoichiometric composition and were polyhedral particles of an average size of 20 microns, as well as particles of stoichiometric composition with a size of no more than 10 microns. An intermetallic compound was found in some areas on the surface of TiC particles in the form of a thin film. In addition, it was found that preheating the initial sample in a furnace to 300 °C before synthesis increases the content of stoichiometric titanium carbide in the obtained cermet.

Keywords: titanium carbide, copper, intermetallic compound, composite material, self-propagating high-temperature synthesis, infiltration

For citation: Latukhin E.I., Kondratieva L.A. Production of cermet in a combustion mode by means of infiltration of Cu + Ti melt into porous titanium carbide / Science intensive technology in mechanical engineering. 2024. № 12 (162). P. 25–30. doi: 10.30987/2223-4608-2024-25-30

Введение

В механизмах и машинах для облегчения относительного движения в системах скольжения, как правило, используются жидкие или консистентные смазочные материалы для минимизации трения и износа. Однако функциональность жидких смазочных материалов снижается в экстремальных условиях, таких как вакуум, радиация, высокое давление и/или температура. В таких условиях эффективно применение материалов, имеющих низкий коэффициент трения. Поэтому композиционные материалы на основе карбида титана привлекают повышенное внимание. Кроме этого, карбид титана из-за его высокого модуля упругости, твердости и температуры плавления является привлекательным соединением для использования в качестве упрочняющей фазы в металлических матрицах. Использование меди и её сплавов в качестве матричного материала позволяет получить композиты с высокой электропроводностью, прочностью и износостойкостью [1, 2].

Композиты с матрицей, содержащей медь и её сплавы, армированные частицами ТіС, были получены разными методами: порошковая металлургия, пропитка заготовок, литье, самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) [3, 4]. Среди этих технологий производства большое внимание уделяется технологии СВС из-за ее низкого энергопотребления и высокой производительности. СВС представляет собой сложный физико-химический процесс, в основе которого лежат экзотермические реакции, приводящие к разогреву исходной смеси вплоть до температур плавления металлических порошков [5, 6]. Исследование различных режимов синтеза в системе Ті-Си-С позволило установить основные закономерности формирования фазового состава и микроструктуры получаемых продуктов [7 – 9]. Большинство исследований проводили в режиме теплового взрыва в вакууме или в защитной атмосфере. Это осложняет применение полученных результатов для практического применения. Кроме того, полученные композиты обладают значительной пористостью, что снижает их прочность. Обработка давлением продуктов реакции непосредственно после синтеза позволила получить образцы с высокой прочностью и износостойкостью [1, 2], но усложнила процесс. Известно, что применение процесса инфильтрации расплава металлов позволяет получать керметы с небольшой пористостью [10, 11]. При этом следует учитывать, что расплав чистой меди плохо смачивает карбид титана. Высокая температура реакции СВС получения продуктов на основе карбида титана позволяет проводить их пропитку расплавом меди [12], но не известно будет ли проходить инфильтрация расплава интерметаллида ТіСи. Целью исследования являлось изучение возможности получения композиционного материала путём инфильтрации расплава интерметаллида ТіСи в пористый каркас из карбида титана.

Материалы и методы

В данной работе для получения композиционного материала путём инфильтрации использовали двухслойные заготовки. Нижний слой состоял из смеси порошков титана и углерода, а верхний слой — из смеси порошков титана и меди. После инициирования реакции СВС в нижнем слое, верхний слой плавился. Затем полученный расплав под действием силы тяжести и капиллярного эффекта пропитывал нижний слой.

Для исследований были взяты порошки марок: титан ТПП-7 и ПТМ, графит С-2 и медь ПМС-1. В соответствии с ранее проведёнными исследованиями [13] качественные образцы пористого карбида титана получали при использовании крупных порошков титана и углерода. Поэтому с графитом смешивали крупный порошок титана ТПП-7, а с порошком меди — мелкий ПТМ.

Исходные порошки взвешивались в стехиометрическом соотношении для получения соединений TiC и TiCu и смешивались в фарфоровой ступке до однородного состояния.

Заготовки получали односторонним прессованием в пресс-форме диаметром 23 мм. Для этого сначала смесь Ті + С массой 7 г засыпалась в пресс-форму, а сверху на нее засыпалась смесь Ті + Си массой 3 г. Одностороннее прессование проводили под давлением 45 МПа. Перед синтезом каждый образец укладывали на слой речного песка. Реакцию горения инициировали электрической спиралью накаливания. Весь процесс синтеза образцов и их охлаждение проводили на воздухе. Опыты проводили в двух вариантах. По первому варианту образцы получали из заготовок без предварительного нагрева (образец № 1). По второму варианту заготовки перед синтезом нагревали в муфельной печи до температуры 300 °С (образец № 2).

Исследования микроструктуры и химического состава были проведены на сколах, взятых из центральной части образца. Микроструктуру полученных продуктов исследовали

на растровом электронном микроскопе TescanVega3 с приставкой локального микрорентгеноспектрального анализа X-асt. Фазовый состав определялся рентгенофазовым методом с помощью дифрактометра ARL X'trA-138 с использованием Cu-излучения при непрерывном сканировании в интервале углов 20 от 5° до 80° со скоростью 2 °/мин.

Результаты

После прохождения реакции в нижнем слое и образования пористого каркаса из ТіС, в обоих вариантах верхний слой расплавился и без остатка впитался в нижний слой. Объёма

жидкой фазы оказалось недостаточно для заполнения пор каркаса из карбида титана. Проведённый рентгенофазовый анализ центральной части образца показал наличие следующих фаз: TiC, Cu и Cu₃Ti. На диаграмме состояния Cu-Ti фаза Cu₃Ti отсутствует, что можно объяснить малой массой образца и, соответственно, высокой скоростью его охлаждения.

Микроструктура полученного продукта, показанная на рис. 1, представлена сферическими и многогранными частицами карбида титана. Результаты элементного химического анализа образцов (в точках) представлены в табл. 1.

1. Элементный химический состав в точках продукта, синтезированного из образцов № 1 и № 2

1. Ultimate composition at the points of the product synthesized from samples № 1 and № 2

	Образец № 1			Образец № 2	
Элемент	Атом. %				
	Точка <i>1</i>	Точка 2	Точка <i>3</i>	Точка 4	Точка 5
Ti	18,17	65,98	52,11	62,99	24,78
С	-	36,79	47,89	36,01	2,46
Cu	81,83	0,23	-	-	72,76

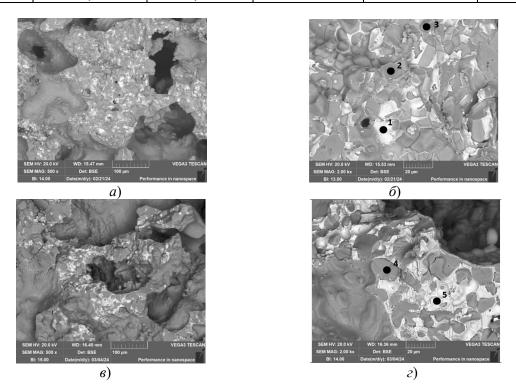


Рис. 1. Микроструктура продукта, синтезированного из системы (Ti + C) + 30 % (Ti + Cu) в режиме СВС на воздухе из двухслойных образцов:

a, δ – образец № 1 без предварительного подогрева; ϵ , ϵ – образец № 2 с предварительным подогревом до 300 °C

Fig. 1. Microstructure of the product synthesized from the (Ti + C) + 30 % (Ti + Cu) system in the SHS mode in two-layer samples:

a, b – sample № 1 without preheating; c, d – sample № 2 with preheating up to 300 °C

Обсуждение

Сферические частицы получались в результате взаимодействия порошка титана с порошком углерода во фронте горения. Данное взаимодействие осуществлялось с выделением тепла за счёт экзотермической реакции Ті + С. Известно, что для самораспространения реакции необходим прямой контакт между жидкой фазой, содержащей растворенные реагенты (Ті с растворенным углеродом) и твердым реагентом (углеродом). Известно, что зерна карбида титана зарождаются с большим дефицитом углерода, поэтому углеродный состав изменяется в сторону стехиометрии во время фазы роста, которая происходит во время охлаждения [14]. Именно сферическая морфология частиц ТіС указывает на тот факт, что в структуре продукта присутствует стехиометрический карбида титана.

Многогранные частицы карбида титана были получены по другому механизму. В процессе синтеза под действием высоких температур, создаваемых экзотермической реакцией в верхнем слое, образуется раствор Сu-Тi, который под действием силы тяжести и капиллярного эффекта, проникает в нижний слой образца, а именно в пористый каркас из карбида титана. В нижнем слое образца не успевший еще прореагировать с титаном углерод может растворяться в расплаве Сu-Ti с образованием Сu-Ti-C. Этот расплав растекается по уже сформировавшимся частицам стехиометрического и нестехиометрического карбида титана.

Как только средняя температура продуктов синтеза снижается, начинается диффузия титана и углерода из расплава на поверхность зёрен карбида титана. Данный процесс сопровождается увеличением размера частиц и приобретением ими многогранной формы. Большие частицы TiC образуются благодаря взаимодействию титана и углерода, выделяющихся из раствора Си-Ті при его кристаллизации, с уже образовавшимися в первоначальный момент синтеза зародышами карбида титана. Таким образом, такой процесс взаимодействия исходных компонентов и промежуточных продуктов реакции горения привел к получению многогранных частиц карбида титана, которые являются нестехиометрическим карбидом титана.

Размер частиц стехиометрического карбида титана не превышает 10 мкм. Средний размер частиц нестехиометрического карбида титана равен 20 мкм.

Кроме ТіС в микроструктуре синтезируемых продуктов (рис. 1) присутствует фаза меди с небольшим количеством в ней титана и фаза интерметаллида, состоящего из меди и титана. О наличии интерметаллида в синтезируемом продукте указывают результаты элементного химического анализа в точках *I* и *5* (табл. 1).

Фазы на основе меди распределены по поверхности частиц карбида титана в виде тонкой пленки, либо заполняют промежутки между частицами ТіС. По тому, как распределены фазы на основе меди в микроструктурах продуктов, и зная о том, что присутствие частиц титана в меди улучшает смачивание частиц ТіС расплавом меди [15], можно предположить, что они не только заполняют пространство между частицами ТіС, но и соединяют их в монолитную структуру. Медь в структуре исследованных продуктов, полученных из образца № 1 и № 2, распределена практически равномерно между всеми частицами ТіС, вне зависимости от их формы, размера и расположения (ближе к поре или к центру стенки) в микроструктуре.

Поверхность стенки (со стороны поры) состоит из прилегающих друг к другу частиц ТіС, между которыми, если смотреть со стороны структуры стенки, а не на поверхность поры, присутствуют фазы на основе меди, а именно интерметаллид, состоящий из титана и меди, и медь с включенными в нее частицами элементного титана.

Наличие в конечном продукте непрореагировавшего с титаном углерода, который по результатам энергодисперсионного анализа находится в медной основе (табл. 1, точка 5), подтверждает ту микроструктуру, которая представлена на рис. 1, а именно то, что синтезированный карбид титана имеет нестехиометрический состав. Так как чем больше состав карбида титана будет нестехиометрическим, тем более многогранную форму будут иметь частицы ТіС [16]. Наличие нестехиометрического TiC в продукте положительно влияет на взаимодействие его с медью, т. к. было установлено [15], что смачивание жидкими расплав том числе и Си, вами, значительно

улучшается на подложке из нестехиометрического TiC с дефицитом углерода.

Таким образом, на основании представленных микроструктур двух образцов (рис. 1), синтезированных на воздухе в режиме твердофазного горения, можно утверждать следующее, что в образце № 1 без предварительного нагрева исходной шихты морфология частиц карбида титана имеет более острые грани и углы в отличие от микроструктуры продукта, полученного из образца № 2. Где форма частиц ТіС имеет наиболее приближенную к стехиометрическому карбиду титана, а именно многогранную, но с полукруглыми стенками граней и тупыми углами.

Заключение

Инфильтрацией расплава интерметаллида TiCu в пористый каркас из карбида титана получен композиционный материал, перспективный для применения в узлах трения скольжения в экстремальных условиях. Продукты синтеза имеют пористую структуру и состоят из частиц стехиометрического карбида титана размером не более 10 мкм и частиц нестехиометрического карбида титана со средним размером частиц 20 мкм. На поверхности частиц ТіС, в виде тонкой пленки на отдельных участках находится сплав меди и титана. Предварительный нагрев образца до 300 °C непосредственно перед синтезом позволяет получить кермет в режиме горения с повышенным содержанием стехиометрического карбида титана.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- 1. Пугачева Н.Б., Николин Ю.В., Быкова Т.М., Сенаева Е.И. Структура и свойства СВС-композита системы Си–Ті–С–В // Физика металлов и металловедение. 2022. Т. 123. № 1. С. 47–54. DOI: 10.31857/S0015323022010107
- 2. Цикарев В.Г., Филиппенков А.А., Филиппов М.А., Алабушев А.В., Шарапова В.А. Опыт получения композиционных материалов системы Ті—Си—С СВС-процессом // Известия высших учебных заведений. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2021. Т. 15. № 4. С. 4—11. DOI: 10.17073/1997-308X-2021-4-11.
- 3. Liang Y.H., Wang H.Y., Yang Y.F., Wang Y.Y., Jiang Q.C. Evolution process of the synthesis of TiC in the Cu-Ti-C system // Journal of Alloys and Compounds. Vol. 452 (2008). pp. 298–303.

- 4. Guo Lei, Yang Yang, Wen Xiaochun, Gao Han, Wang Zhe, Guo Zhancheng. Synthesis of Cu-based TiC_x composites via in-situ reaction between Cu_xTi melt and dissolvable solid carbon // Powder Technology. Vol. 362 (2020). pp. 375–385.
- 5. **Мержанов А.Г., Мукасьян А.С.** Твердопламенное горение. М.: ТОРУС ПРЕСС, 2007. 336 с.
- 6. **Амосов А.П., Боровинская И.П., Мержанов А.Г.** Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов. М.: Машиностроение-1, 2007. 568 с.
- 7. Lei Guo, Yang Yang, Yinuo Du, Hao Sun, Zhancheng Guo. In-situ formation of titanium carbide in coppertitanium-carbon system: A review // Powder Technology. Vol. 403 (2022). pp. 117389.
- 8. **Zarrinfar N., Kennedy A.R., Shipway P.H.** Reaction synthesis of Cu-TiCx master-alloys for the production of copper-based composites // Scripta Materialia. Vol. 50 (2004). pp. 949–952.
- 9. Rathod S., Modi O.P., Prasad B.K., Chrysanthou A., Vallauri D., Deshmukh V.P., Shah A.K. Cast in situ Cu-TiC composites: synthesis by SHS route and characterization, // Materials Science and Engineering: A. Vol. 502. (2009). pp. 91–98.
- 10. Амосов А.П., Латухин Е.И., Умеров Э.Р. Применение процессов инфильтрации и самораспространяющегося высокотемпературного синтеза для получения керметов. Обзор // Известия вузов. Цветная металлургия. 2021. Т. 27, № 6. С. 52–75. DOI: 10.17073/0021-3438-2021-6-52-75
- 11. **Амосов А.П., Латухин Е.И., Умеров Э.Р., Давыдов Д.М.** Получение длинномерного МАХ-кермета Ti₃AlC₂-Al методом CBC с самопроизвольной инфильтрацией расплавом алюминия // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2022. №3. C. 52—75. DOI: 10.17073/1997-308X-2022-3-24-36.
- 12. Amosov A.P., Latukhin E.I., Ryabov A.M., Umerov E.R., Novikov V.A. Application of SHS process for fabrication of copper-titanium silicon carbide composite (Cu-Ti₃SiC₂) // J. of Physics: Conf. Series. 2018. V.1115. No. 4. Art. no 042003. DOI:10.1088/1742-6596/1115/4/042003.
- 13. **Латухин Е.И., Умеров Э.Р., Луц А.Р.** Самораспространяющийся высокотемпературный синтез заготовок пористого карбида титана для последующей инфильтрации расплавами // Заготовительные производства в машиностроении. 2021. Т. 19. № 7. С. 322–330. doi:10.36652/1684-1107-2021-19-7-322-330.
- 14. Cochepin B., Gauthier V., Vrel D., Dubois S. Crystal growth of TiC grains during SHS reactions // Journal of Crystal Growth. Vol. 304 (2007). pp. 481–486.
- 15. Frage N., Froumin N., Aizenshtein M., Kutsenko L., Fuks D., Dariel M.P. Reactive wetting in titanium carbide/non-reactive metal systems // Current Opinion in Solid State and Materials Science. Vol. 9 (2005). pp. 189–195.
- 16. Dong Bai-Xin, Yang Hong-Yu, Qiu Feng, Li Qiang, Shu Shi-Li, Zhang Bing-Qi, Jiang Qi-Chuan. Design of TiC_x nanoparticles and their morphology manipulating mechanisms by stoichiometric ratios: Experiment and first-principle calculation // Materials and Design. Vol. 181 (2019). pp. 107951.

REFERENCES

- 1. Pugacheva N.B. Nikolin Yu.V., Bykova T.M., Senaeva E.I. Structure and properties of the SHS composite of the Cu–Ti–C–B system // Physics of metals and metallurgical science. 2022, vol. 123, no. 1, pp. 47–54. DOI: 10.31857/S0015323022010107
- 2. Tsikarev V.G., Filippenkov A.A., Filippov M.A., Alabushev A.V., Sharapova V.A. The experience of obtaining composite materials of the Ti–Cu–C system by the SHS process // Izvestia of higher educational institutions. Powder metallurgy and functional coatings. 202, vol. 15, no. 4, pp. 4-11. DOI: 10.17073/1997-308X-2021-4-11
- 3. Liang Y.H., Wang H.Y., Yang Y.F., Wang Y.Y., Jiang Q.C. Evolution process of the synthesis of TiC in the Cu-Ti-C system // Journal of Alloys and Compounds. Vol. 452 (2008), pp. 298–303.
- 4. Guo Lei, Yang Yang, Wen Xiao-chun, Gao Han, Wang Zhe, Guo Zhan-cheng. Synthesis of Cu-based TiCx compo-sites via in-situ reaction between CuxTi melt and dissolvable solid carbon // Powder Technology. Vol. 362 (2020). pp. 375–385.
- 5. Merzhanov A.G., Mukasyan A.S. Solid flame. Moscow: TORUS PRESS, 2007, 336 p.
- 6. Amosov A.P., Borovinskaya I.P., Merzhanov A.G. Powder technology of self-propagating high-temperature synthesis of materials. Moscow: Mashinostroenie-1, 2007, 568 p.
- 7. Lei Guo, Yang Yang, Yinuo Du, Hao Sun, Zhancheng Guo. In-situ formation of titanium carbide in copper-titanium-carbon system: A review // Powder Technology. Vol. 403 (2022). pp. 117389.
- 8. Zarrinfar N., Kennedy A.R., Ship-way P.H. Reaction synthesis of Cu-TiCx master-alloys for the production of copper-based composites // Scripta Materialia. Vol. 50 (2004), pp. 949–952.
- 9. Rathod S., Modi O.P., Prasad B.K., Chrysanthou A., Vallauri D., Deshmukh V.P., Shah A.K. Cast in situ Cu-TiC composites: synthesis by SHS route and

- characterization, // Materials Science and Engineering: A. Vol. 502. (2009). pp. 91–98.
- 10. Amosov A.P., Latukhina E.I., Umerov E.R. Application of infiltration processes and self-propagating high-temperature synthesis for manufacturing cermets. Review // Izvestiya vuzov. Non-ferrous metallurgy. 2021, vol. 27, no. 6, pp. 52–75. DOI: 10.17073/0021-3438-2021-6-52-75
- 11. Amosov A.P., Latukhina E.I., Umerov E.R., Davydov D.M. Investigation of possibility of fabrication of long-length samples of Ti3AlC2–Al MAX-cermet by the SHS method with spontaneous infiltration by aluminum melt // Izvestia vuzov. Powder metallurgy and functional coatings. 2022, no.3, pp. 52–75. DOI: 10.17073/1997-308X-2022-3-24-36.
- 12. Amosov A.P., Latukhin E.I., Ryabov A.M., Umerov E.R., Novikov V.A. Application of SHS process for fabrication of copper-titanium silicon carbide composite (Cu-Ti3SiC2) // J. of Physics: Conf. Series. 2018. V.1115. No. 4. Art. no 042003. DOI:10.1088/1742-6596/1115/4/042003.
- 13. Latukhin E.I., Umerov E.R., Lutz A.R. Self-propagating high-temperature synthesis of porous titanium carbide blanks for subsequent infiltration by melts // Procurement production in mechanical engineering. 2021, vol. 19, no. 7, pp. 322–330. doi:10.36652/1684-1107-2021-19-7-322-330.
- 14. Cochepin B., Gauthier V., Vrel D., Dubois S. Crystal growth of TiC grains during SHS reactions // Journal of Crystal Growth. Vol. 304 (2007). pp. 481–486.
- 15. Frage N., Froumin N., Aizenshtein M., Kutsenko L., Fuks D., Dariel M.P. Reactive wetting in titanium carbide/non-reactive metal systems // Current Opinion in Solid State and Materials Sci-ence. Vol. 9 (2005). pp. 189–195.
- 16. Dong Bai-Xin, Yang Hong-Yu, Qiu Feng, Li Qiang, Shu Shi-Li, Zhang Bing-Qi, Jiang Qi-Chuan. Design of TiCx nanoparticles and their morphology manipulating mechanisms by stoichiometric ratios: Experiment and first-principle calculation // Materials and Design. Vol. 181 (2019). pp. 107951.

Вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article. The authors declare no conflicts of interests.

Статья поступила в редакцию 13.04.2024; одобрена после рецензирования 21.08.2024; принята к публикации 03.09.2024.

The article was submitted 13.04.2024; approved after reviewing 21.08.2024; assepted for publication 03.09.2024.