**Исследование жидкометаллической коррозии межзёренных границ в системе Ni/Pb**

***Савельев С.А.***

*Студент, 1 курс магистратуры*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*E-mail: savelyev.s.a.2002@gmail.com*

Жидкометаллическая коррозия границ зёрен (ГЗ) в поликристаллических материалах является нежелательным побочным явлением при проведении важных технологических процессов, таких как пайка, горячее цинкование, жидкофазное спекание и работа жидкометаллических теплообменников. Термодинамические характеристики, определяющие характер смачивания ГЗ расплавом – это межфазная энергия и энергия ГЗ. При заданной температуре процесса энергия ГЗ определяется взаимной ориентации стыкующихся зёрен и плоскости ГЗ, причем задача по определению общего вида этой зависимости остается неразрешенной даже для высокосимметричных кристаллических упаковок [1]. Система Ni/Pb является хорошей моделью для исследования смачивания ГЗ расплавом [2], при этом систематических исследований влияния геометрии ГЗ на смачиваемость не проводилось.

Целью данной работы является исследование зависимости смачиваемости ГЗ в поликристаллическом никеле расплавом свинца от разориентировки зёрен и ориентации плоскостей ГЗ. Образцы поликристаллического никеля и свинца (с добавлением 0.9 мас. % Ni) помещалась в вакуумированную ампулу; в трубчатой печи образцы выдерживались 5, 10 или 20 дней при 700°C; после закаливания до комнатной температуры образцы были поперечно разрезаны, отполированы и протравлены (10 секунд в концентрированной HNO3) для проявления ГЗ. Поверхности срезов были изучены с применением растровой электронной микроскопии (РЭМ) и дифракции отраженных электронов (ДОЭ). Из микрофотографий были извлечены данные о наличии/отсутствии свинца на ГЗ. Ориентация плоскостей ГЗ была определена методом последовательных срезов.

Собранные по вышеописанной процедуре данные о параметрах 717 ГЗ использовались для построения предсказательной модели, способной классифицировать их как смачиваемые/не смачиваемые жидким свинцом на основании данных о взаимной ориентации зёрен и ориентации ГЗ. Для статистической обработки взаимная ориентация двух зёрен представлялась в форме кватерниона вращения, переводящего кристаллическую решётку первого зерна в решётку второго; ориентация плоскости межзёренной границы – в виде вектора нормали к этой плоскости в системе координат, связанной с кристаллической решёткой одного из зёрен. Единственный алгоритм, показавший статистически значимую точность предсказания – бустинговый алгоритм машинного обучения XGBoost. При перекрестном тестировании средняя точность предсказания факта смачивания границы свинцом составила 65%.

В процессе статистического анализа результатов исследования образцов системы «поликристаллический Ni – жидкий Pb» методами РЭМ и ДОЭ были получены данные о геометрии и смачиваемости 717 ГЗ. Впервые было предложено использовать методы ИИ для предсказания характера взаимодействия ГЗ Ni с расплавом Pb. Была построена модель машинного обучения, предсказывающая смачивание межзёренных границ никеля жидким свинцом с точностью 65%.

**Литература**

1. Korolev, V.V., Bean, J.J., Nevolin, Y.M. et al. Comparing Five and Lower-Dimensional Grain Boundary Character and Energy Distributions in Copper: Experiment and Molecular Statics Simulation // Metall Mater Trans A 53, 449–459 (2022).

2. J. Bernardini, J.-P. Monchoux, D. Chatain and E. Rabkin. Liquid metal penetration in metallic polycrystals: New tools for a challenging unsolved problem of materials science // J. Phys. IV France 12 (2002) Pr8-229