ПРИОРИТЕТНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ 3.6. Механика твердого тела, физика и механика деформирования и разрушения, механика композиционных и наноматериалов, трибология

Программа 3.6.1. Разработка основополагающих принципов физической мезомеханики материалов как многоуровневых систем и проблемы создания на их основе материалов и конструкций новых поколений с наноструктурными подсистемами (координатор акад. В. Е. Панин)

В Институте физики прочности и материаловедения с участием Института биохимии СО РАМН теоретически и экспериментально обосновано существование особого класса двухфазных наноструктурных состояний в конденсированных средах. Они возникают в сильно неравновесных твердых телах вблизи нуля их термодинамического потенциала Гиббса как предпереходные состояния нанокристаллыаморфные прослойки (рис. 46). В биологических мембранах, которые являются жидкими кристаллами, наноструктурные состояния определяют их внутреннюю структуру и все процессы обмена. Методология описания наноструктурных состояний в любых конденсированных средах является общей. В полях внешних воздействий или при введении наномодификаторов в среде с наноструктурными состояниями возникают локальные структурнофазовые превращения. Они определяют изменение свойств среды, протекание недиффузионных процессов массопереноса (обмена в клетках) в градиентных внутренних полях. развитие обратимой многоуровневой фрагментации исходной структуры на нано-, микро- и мезомасштабных уровнях (рис. 47). При закритических внешних воздействиях фрагментация среды с наноструктурными состояниями выходит на макромасштабный уровень, становится необратимой и завершается деградацией структуры и свойств исходной среды (рис. 48). Разработаны практические рекомендации в области наноинженерии тонких пленок (создание smart coating) и влияния внешних воздействий на биологические мембраны.

В том же Институте получено теоретическое объяснение квадратичного закона дисперсии автоволн локализованного пластического течения, наблюдаемых на стадиях легкого скольжения и линейного деформационного



Рис. 46. Зона С предпереходных наноструктурных состояний на фазовой диаграмме зависимости термодинамического потенциала Гиббса *F*(*v*) от молярного объема *v* вблизи *F*(*v*) = 0.



Рис. 47. Обнаружение неизвестных ранее подвижных наноструктурных фазовых границ субзерен в сильно неравновесных средах, эффективно релаксирующих концентраторы внутренних напряжений. Эффект используется в «умных покрытиях» (smart coating).



Рис. 48. Стадии изменения структуры эритроцита при взаимодействии с солями тяжелых металлов: исходная структура (*a*), ее фрагментация (*б*) и полная деградация (*в*).



Рис. 49. Квадратичные дисперсионные соотношения для автоволн локализованного пластического течения.

Линии — теоретические кривые, точки соответствуют разным материалам.

упрочнения. Экспериментально и теоретически установлены условия существования максимумов и минимумов дисперсионных кривых (рис. 49), отвечающих различным механизмам деформационного упрочнения моно- и поликристаллов. Показано, что из уравнения дисперсии следует существование инварианта для упругой и пластической деформации среды.

Программа 3.6.2. Научные основы создания наноструктурных и нанодисперсных материалов, композиций и покрытий на металлической, керамической и полимерной основах (координатор докт. физ.-мат. наук С. Г. Псахье)

В Институте физики прочности и материаловедения с использованием методики темнопольного электронно-микроскопического анализа впервые обнаружены высокая кривизна-кручение решетки и внутренние упругие напряжения в нанокристаллической фазе нанокомпозитных сверхтвердых покрытий при широком спектре значений кривизны от нулевых до 300 град./мкм во всем изученном (до 20 нм) интервале значений размеров областей когерентного рассеяния нанокристаллитов нитрида титана (рис. 50). Выполнена оценка величины (до *E*/200, *E* — модуль Юнга) напряжений в нанокристаллах, и получены данные об их вы-

Механика и энергетика



Рис. 50. Фрагмент темнопольного анализа изгиба-кручения кристаллической решетки отдельных нанокристаллов в сечении А—А₁ покрытия Ti—Si—B—N.

а — выделены фрагменты нанокристаллической структуры с кривизной кристаллической решетки более 100 град./мкм; *б* — соответствующая схема дипольного изменения ориентации отражающих плоскостей.

сокой (до $T \approx 1000$ °C) термической стабильности. Предложена структурная модель дипольной конфигурации кривизны кристаллической решетки. Высказано предположение, что источниками такой кривизны являются градиенты напряжений, создаваемые дефектами типа дислокаций и дисклинаций, а также градиенты точечных дефектов, их кластеров и неоднородностей распределения элементов покрытий в объеме и на границах нанокристаллов.

В том же Институте установлено, что при интенсивной пластической деформации измельчение зерен происходит преимущественно в микро- и мезополосах локализованной пластической деформации, причем наиболее интенсивное измельчение зерен наблюдается на пересечении этих полос. Это дает научное обоснование закономерностям формирования

ультрамелкозернистой структуры при равноканальном угловом прессовании (РКУП) и всестороннем изотермическом прессовании (ВИП), когда изменение маршрута прессования при РКУП и смена оси деформации при ВИП обеспечивают принудительное пересечение полос локализованной пластической деформации. Уменьшение среднего размера зерен вплоть до 40-60 нм не приводит к появлению новых механизмов деформации при нагружении металлических материалов, однако деформационные механизмы, характерные для высокотемпературной деформации, в ультрамелкозернистых материалах начинают развиваться при температурах на 150-200 градусов ниже, чем в крупнозернистых металлах и сплавах (рис. 51). Полученные результаты позволяют целенаправленно выбирать технологические параметры того или иного метода интенсивной



Рис. 51. Электронно-микроскопические светлопольные (*a*, *в*) и темнопольные (*б*) изображения микроструктуры областей с наиболее мелкими фрагментами зеренно-субзеренной структуры образцов, деформированных при 673 К.

а — микрополосы локализованной деформации в никелиде титана после abc-прессования; *б* — нанозерна в микрополосах локализованной деформации; *в* — деформационный рельеф вокруг отпечатка индентора, свидетельствующий о развитии зернограничного проскальзывания в чистом субмикрокристаллическом алюминии при комнатной температуре. Стрелками показаны границы отпечатка.



Рис. 52. Зависимости в двойных логарифмических координатах упругого модуля керамики (*a* — данные расчетов, *б* — экспериментальные данные) и размеров кристаллитов в керамике (*в*) от пористости.

пластической деформации для получения материала конкретного назначения с заданной микроструктурой и комплексом эксплуатационных характеристик.

При моделировании методом подвижных клеточных автоматов в трехмерной постановке и экспериментальном изучении механических свойств пористой керамики со стохастическим распределением пор обнаружен перколяционный переход от изолированной поровой структуры к сообщающейся и показано, что это приводит к характерному изменению зависимости упругих и прочностных свойств от общей пористости. При этих же значениях пористости наблюдается экстремум на зависимости размеров кристаллитов (рис. 52). Эти данные являются фундаментальным подтверждением положения о принципиально немонотонной зависимости физических свойств пористых сред от строения порового пространства при стохастическом распределении пор.

Программа 3.6.3. Механика деформирования и разрушения однородных и композитных материалов и конструкций для транспортных и авиационных систем (координатор член-корр. РАН Б. Д. Аннин)

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева исследована асимптотика функционалов энергии для различных моделей упругих тел с трещинами. Получены производные функционалов энергии по параметру общего возмущения областей как для плоской и пространственной задач теории упругости, так и



Рис. 54. Срединная поверхность пластины с трещиной.

для более сложной модели — модели пластины Кирхгофа—Лява с криволинейными трещинами (рис. 53), на берегах которых заданы условия непроникания. Выведены достаточные условия существования инвариантных интегралов и дан их общий вид. Впервые получены инвариантные интегралы типа Черепанова— Райса для упругих тел с криволинейными трещинами, на которых заданы условия непроникания берегов.

В том же Институте предложена двухмасштабная модель, описывающая продвижение вершины трещины при малоцикловой усталости. Исходный материал состоит из квазихрупких волокон с тонкими прослойками, материал которых до деформирования обладает квазивязким типом разрушения, а после неупругого деформирования прослоек тип разрушения меняется на квазихрупкий. Макротрещина расположена перпендикулярно волокнам. Предложенная модель использует а характеристики диаграммы напряжениядеформация материала при циклическом нагружении и критическую величину диссипируемой работы материала (рис. 54). Накопление повреждений в волокнах связывается с неупругим деформированием материала волокон в зоне предразрушения. Описано продвижение вершины трещины скачками, длина которых совпадает с длиной зоны предразрушения. Установлены осредненные зависимости скорости продвижения вершины макротрещины при пульсирующем циклическом нагружении. Скорость продвижения вершины макротрещины существенно возрастает с ростом трещины, что согласуется с экспериментальными результатами. Даны оценки констант предлагаемой модели. Описан долом конструкции. Получены простые соотношения для критических параметров разрушения и времени жизни конструкции.

В Институте вычислительного моделирования по заданию рабочей группы ОЭММПУ

РАН на основе посещения СШГЭС проведены предварительные расчетные оценки причин, источников и сценариев катастрофы 17 августа 2009 г. Разработана модель живучести многокомпонентных систем (несущие разъемные соединения конструкций силовых агрегатов атомных реакторов, гидроагрегатов, газовых турбин), учитывающая накопление повреждений при нестационарных режимах нагружения и перераспределение аварийных нагрузок при наличии полностью или частично отказавших элементов.

На базе анализа напряженно-деформированного состояния (рис. 55) и имеющейся информации о нагрузках и воздействиях выполнены модельные расчеты долговечности соединения крышки со статором гидротурбины. Расчеты осуществлялись на основе гипотезы линейного суммирования повреждений. Были определены режимы нагружения, вносящие основной вклад в уровень повреждений циклы пуск—остановка гидроагрегата и регулирования мощности на переходных режимах. Получены значения ресурса данного соедине-



Рис. 54. Диаграммы малоциклового нагружения Ст3 в состоянии поставки (внизу) и после предварительного растяжения (вверху). *1*, *3* — однократное нагружение, *2* — диаграмма циклического нагружения.



Рис. 55. Уровни напряжений на крышке статора гидротурбины.

ния для различных режимов нагружения и оценка общего накопленного повреждения.

В Институте физико-технических проблем Севера разработан метод оценки хладостойкости тонкостенных металлоконструкций типа магистральных трубопроводов и резервуаров большого диаметра после длительной эксплуатации путем расчетного определения второй критической температуры вязкохрупкого перехода с использованием предельной кривой потери пластичности, установленной испытаниями на образцах характеристик статической трещиностойкости, механических свойств и показателя потери пластичности, с учетом конструктивных размеров. На основе проведенных исследований предложен физический механизм ветвления трещины: переход трещины от прямолинейного распространения к ветвлению происходит, когда ее скорость V достигает своего предельного значения V^* , при котором поток энергии упругих деформаций, поступающий в вершину трещины, G, превышает энергию G^* , которая затрачивается на сопротивление материала росту одиночной трещины, т. е. при $G > G^*$ (необходимое условие) и $V = V^*$ (достаточное условие). Величина G^* зависит от деформационных свойств материала при $V \rightarrow V^*$ и толщины образца.

Программа 3.6.4. Механика гетерогенных сред и нанотехнологии (координатор акад. В. М Фомин)

В Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича совместно с Институтом химии и химической технологии для процессов обогащения гелия из природного газа впервые на основе модифицированных ценосфер получены микроструктурированные сферические мембраны с планарно-ориентированными кристаллитами муллита, обеспечивающими развитие межфазных границ. Исследованы диффузионные свойства исходных и модифицированных ценосфер в отношении гелия на лабораторной установке, а также не модифицированных стеклянных микросфер. Развитие межфазных границ за счет образования планарно-ориентированных кристаллитов муллита приводит к увеличению проницаемости гелия у оболочки ценосфер при T = 23 °C в 14 раз. Показана автомодельность экспери-



Рис. 56. Зависимость падения давления вне микросфер от времени эксперимента в безразмерных переменных для различных начальных давлений гелия, Па: 665880 (1), 334290 (2), 51030 (3).

ментальных кривых сорбции (рис. 56). Степенной закон фильтрации гелия сквозь стенки ценосфер имеет наилучшее совпадение с результатом эксперимента в случае показателя степени больше 1.

В том же Институте разработана и реализована схема соплового узла для холодного газодинамического напыления с несколькими точками ввода порошка, позволяющая формировать металлокерамические смеси непосредственно в тракте сопла и наносить многокомпонентные покрытия в оптимальном режиме для всех компонентов смеси. Показана эффективность такой схемы при напылении металлокерамических смесей разного состава.

Получены керамические образцы из нанопорошков оксида вольфрама, закиси меди, диоксида циркония в смеси с диоксидом кремния с относительно небольшим размером зерна (порядка 1 мкм). Различными методами исследованы синтезированные порошки и полученные из них керамические материалы. Показано, что из наноразмерных порошков возможно приготовление материалов, которые могут быть полезны в промышленных приложениях (рис. 57). Предварительные исследования показали, что модифицированные таркосилом образцы эпоксидных и резиновых композитов имеют более высокую прочность на разрыв, а добавки таркосила в лакокрасочные композиты повышают их адгезию, твердость и износостойкость.

В Тюменском филиале Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича предложены механизм и модель



Рис. 57 Сканирующая электронная микроскопия керамики, полученной из нанопорошка оксида вольфрама WO₃.

нуклеации твердой фазы при динамическом воздействии на переохлажденную жидкость с пузырьками или в виде капель. На поверхности пузырьков или капель развиваются смыкающиеся субмикронные парогазовые каверны, которые выступают в качестве активной подложки для гетерогенной нуклеации и роста зародышей твердой фазы. Установлено, что дополнительный рост вероятности нуклеации может быть обусловлен коалесценцией докритических ядер кристаллизации за счет их концентрирования на межфазной границе при сжатии пузырьков и в окрестности особых точек стоксовых течений вокруг включений.