ПРИОРИТЕТНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ III.20. МЕХАНИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА, ФИЗИКА И МЕХАНИКА ДЕФОРМИРОВАНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ, МЕХАНИКА КОМПОЗИЦИОННЫХ И НАНОМАТЕРИАЛОВ, ТРИБОЛОГИЯ

Программа III.20.1. Физическая мезомеханика, физика прочности и неравновесная термодинамика твердых тел как многоуровневых систем и проблемы создания на их основе новых материалов, включая наноструктурные (координатор акад. В. Е. Панин)

В Институте физики прочности и материаловедения теоретически и экспериментально показано, что важнейшим структурным па-



Рис. 61. Лабиринтная структура двумерной модуляции кривизны в пленке Al на подложке Si с промежуточным подслоем полистирола.



Рис. 62. Нанодиполи частичных дисклинаций в субмикрокристалле никеля после интенсивной пластической деформации кручением под давлением.

раметром планарных 2D-систем является их локальная упругая кривизна, которая может достигать сотен градусов/микрометр (рис. 61). Она определяет локальные структурные состояния в 2D-системах, которые могут качественно отличаться от равновесных структур данного материала в 3D-кристаллическом состоянии. Локальная кривизна стабилизирована нанодиполями частичных дисклинаций (рис. 62). Они безынерционно и обратимо некристаллографически перемещаются вместе с локальной кривизной в градиентных полях внутренних напряжений по механизму структурно-фазовых переходов кривизны (рис. 63). Новый тип структурно-фазовых переходов кривизны характерен только для 2D-систем и определяет закономерности их поведения в полях внешних воздействий (графены, наноструктурные пленки, тонкие оболочки, многослойные наноструктурные системы и др.). Новое явление имеет широкое практическое применение.

В этом же Институте показано, что зависимости, характеризующие развитие автоволн локализованной пластической деформации (зависимость скорости распространения от коэффициента деформационного упрочнения, дисперсия автоволн и зависимость длины автоволны от размера зерна в поликристаллах), а



Рис. 63. Модуляция кривизны на межзеренной границе в нагруженном поликристалле (численный эксперимент).



Рис. 64. Изменение микротвердости композитов WC-80Г4 (*a*) и WC-80Г20 (*б*) от поверхности трения в глубину образцов после испытания на трение со скоростью 10 м/с.

также уравнение автоволнового пластического течения являются следствиями упругопластического инварианта пластической деформации. Рассмотрены два типа ближнего порядка, соответствующие различным функциям распределения атомов в деформируемом кристалле. Возбуждение ближнего порядка первого типа соответствует упруго деформированному кристаллу. Ближний порядок второго типа приводит к неупругой деформации поверхностного слоя и появлению избыточного объема. Состояние поверхностного слоя одноосно деформированного кристалла характеризуется комплексным параметром порядка. При исследовании композитов карбид вольфрама-сталь обнаружен дальнодействующий эффект осцилляции микротвердости от поверхности трения в глубь материала, обусловленный формированием механических напряжений на поверхности трения (рис. 64).

Проведены систематические исследования влияния параметров двухслойной системы

фольга/образец и условий нагружения на количественные характеристики поверхностных структур, образующихся на начальных стадиях формирования рельефа на фольгах монокристалла алюминия кубической ориентации при циклическом растяжении. Установлено, что увеличение толщины фольг приводит к линейному росту ширины, периода макроскопических полос и к уменьшению периода твидовой структуры (рис. 65). Уменьшение периода твидовой структуры может быть связано с влиянием моментных напряжений, которые растут с ростом толщины фольг. В диапазоне изменения частоты циклического нагружения от 2 до 16 Гц период, ширина макроскопических полос и период твидовой структуры изменяются незначительно. Это свидетельствует о том, что в исследованном диапазоне частоты циклического нагружения концентрация дефектов, созданных деформационно-индуцированным движением дислокаций, различается незначительно.



Рис. 65. Макроскопические полосы на фольгах монокристалла алюминия толщиной 120 мкм (*a*) и 330 мкм (*б*) после *N* ~ 6000 циклов.

Программа III.20.2. Научные основы создания материалов и покрытий с неравновесными структурно-фазовыми состояниями на основе многоуровневого подхода (координатор член-корр. РАН С. Г. Псахье)

В Институте физики прочности и материаловедения проанализирована проблема дизайна нанокомпозитных покрытий с особыми свойствами. В качестве основных объектов поиска предложены многоэлементные покрытия и новая концепция их формирования — самоорганизация микроструктуры на стадии зарождения взаимонерастворимых фаз (рис. 66). Разработаны физические принципы выбора составов, создано новое технологическое оборудование синтеза многоэлементных нанокомпозитных покрытий с использованием совмещения ионно-плазменного и магнетронного методов в едином технологическом цикле. Получено экспериментальное подтверждение предлагаемых принципов конструирования нанокомпозитных покрытий конструкционного и инструментального назначения, перспективных для повышения когезивной, адгезионной прочности и других функциональных свойств.

В том же Институте на примере низкоуглеродистых сталей 10Г2ФТ и 06МБФ установлено повышение термической стабильности (до 500 °C), сформированной в них методом равноканального углового прессования неравновесной ультрамелкозернистой структуры с увеличением энергии активации собирательной рекристаллизации Q (303 ÷ 420 кДж/моль), по сравнению с аналогичной структурой чистого и армко-железа (стабильна до 250 °C, Q~180 кДж/моль). Это обусловлено выделением однородно распределенных высокодисперсных карбидных фаз в исследуемых сталях (рис. 67).

При исследовании влияния термических обработок на структуру и морфологию нанокристаллического порошка ZrO₂—Y₂O₃ обнаружено, что увеличение температуры приводит к уменьшению среднего размера частиц, изначально представляющих собой пористые агломераты с большой удельной поверхностью, до монолитных полидоменных частиц, размеры которых соизмеримы с размерами кристаллитов. Оценка энергии активации на начальной и конечной стадиях отжига показала, что в этом случае при низких температурах она равна 35 кДж/моль, при высоких — 70 кДж/моль, а рост зерна при этом определяется поверхностной диффузией.

Исследование процесса трения скольжения монокристалла меди показало, что существуют предпочтительные ориентации монокристалла, которые обеспечивают более низкий коэффициент трения по сравнению с другими ориентациями. Для установления природы данного явления были выбраны две ориентации монокристалла меди [110] и [111], различающиеся фактором Шмида соответствующих систем скольжения. На рис. 68 показаны зависимости коэффициента трения от времени испытаний для выбранных ориентаций монокристалла меди. Анализ следов скольжения после испытаний на трение показал, что более высокий коэффициент трения для ориентации кристалла [110] соответствует большему фактору Шмида систем скольжения для данной ориентации кристалла. При такой ориентации кристалла наблюдаются высокая плотность



Рис. 66. Схема формирования нанокомпозитных многоэлементных покрытий.



Рис. 67. Влияние температуры отжига на микроструктуру (на примере стали 06МБФ) и микротвердость (в сравнении с армко-железом) ультрамелкозернистых низкоуглеродистых сталей, полученных методом РКУП:

а — без отжига; *б* — отжиг 400 °С,1 ч; *в* — 500 °С, 1 ч; *г* — 600 °С, 1 ч; *д* — 700 °С, 1 ч.

следов скольжения и интенсивное фрагментирование материала в поверхностном слое, прилегающем к поверхности трения. Другая ориентация монокристалла характеризуется отсутствием фрагментации и низкой плотностью следов скольжения. Таким образом, показано, что низкому коэффициенту трения соответствует такая ориентация монокристалла, которая обеспечивает минимальное деформирование поверхностного слоя.



Рис. 68. Зависимости коэффициента трения от времени испытаний для монокристаллов меди с ориентациями: M3[110](111)(112) и M10[111](110)(112).

Программа III.20.3. Исследование многоуровневых процессов деформирования и разрушения неоднородных материалов и конструкций, живучести и аварийных ситуаций технических систем (координатор член-корр. РАН Б. Д. Аннин)

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева исследовано распространение внутренней трещины нормального отрыва скачками в квазихрупких материалах при циклическом нагружении. Рассматривалось нестационарное нагружение упругопластического материала при пульсирующем приложении нагрузки (рис. 69). Для анализа указанного процесса предлагается использовать диаграммы квазихрупкого разрушения тел при циклическом нагружении. Одна из кривых предлагаемой диаграммы напоминает диаграмму Китагава—Такахаши. В явном виде получены оценки безразмерной средней скорости продвижения вершины трещины за один цикл нагружения при скачкообразном подрастании трещины в пластинах конечной ширины (рис. 70).

В том же Институте было исследовано влияние различных сочетаний плакируемого и плакирующего металлов при плакировании взрывом торцевых поверхностей цилиндрических изделий на свойства сварных соединений. На примере пар из меди, алюминия и стали показаны широкие возможности способа, который теперь можно применять на практике. Примеры соединений показаны на рис. 71.

В Специальном конструкторско-технологическом бюро «Наука» обоснованы теорети-





Здесь и на рис. 70: 2l - длина трещины; r - диаметр зерна регулярной структуры квазихрупкого материала; w -ширина пластины; $\sigma_{\infty} -$ заданная амплитуда пульсирующей нагрузки; $\sigma_Y -$ предел текучести; σ_{∞}^0 и σ_{∞}^* - критические нагрузки по необходимому и достаточному критериям разрушения; V -средняя скорость продвижения вершины трещины.

ческие предпосылки, разработаны модели и количественные показатели оценки живучести сложных систем. Разработаны численные модели деформирования и разрушения структурно-неоднородных материалов и многокомпонентных систем, включающих параллельное и последовательное соединения элементов; сформулированы критерии и обоснованы методы обеспечения защищенности технических систем от тяжелых катастроф, обусловленных исчерпанием живучести конструкций.

В Институте физико-технических проблем Севера им. В. П. Ларионова на основе анализа существующих гипотез водородного охрупчивания и современных представлений о физической природе образования холодных трещин предложена феноменологическая модель механизма обратимой водородной хрупкости.

В этом же Институте подтверждено, что при использовании импульсного режима сварки в 1,5—2,5 раза уменьшается размер зерна сварного шва и зоны термического влияния как при положительных, так и при отрицательных климатических температурах, что положительно сказывается на повышении прочностных характеристик сварного соединения. Результаты исследований показали возможность



Рис. 70. Средняя скорость продвижения вершины трещины в пластинах конечной w/r = 4000 (кривые l, 2, 3) и бесконечной ширины (кривые 4, 5, 6) при линейном суммировании повреждений, причем кривые 2 и 5, 1 и 4, 3 и 6 соответствуют нормальному, повышенному и пониженному режимам нагружения.



Рис. 71. Сечения различных пар материалов, проходящие через продольную ось цилиндрических изделий.



Рис. 72. Температурные зависимости ударной вязкости образцов с надрезом, изготовленных из сварного соединения трубы диаметром 530 мм, стали марки 09Г2С.

а — в околошовной зоне; *б* — в зоне металла шва.

определения алгоритмов импульсного управления процессами сварки в условиях холодного климата.

Выявлен положительный эффект ультразвуковой обработки кольцевых сварных стыков труб из низколегированных сталей в диапазоне отрицательных климатических температур: по сравнению с необработанным материалом ударная вязкость металла шва (рис. 72, *б*) сварной пробы из стали 09Г2С в среднем выше на 30 %, металла околошовной зоны (рис. 72, a) — на 24 %, в сварной пробе из стали 13Г1СУ ударная вязкость металла шва выше на 12 %. Установлено, что ультразвуковая обработка не уступает термической обработке по своему положительному влиянию на значения ударной вязкости сварных стыков труб из низколегированных сталей 09Г2С и 13Г1СУ при различных температурах.

Программа III.20.4. Физико-химическая механика гетерогенных сред и технологии на их основе (координатор акад. В. М. Фомин)

В Институте теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича впервые для высокопроизводительного нанесения защитного покрытия методом холодного газодинамического напыления (ХГН) на внутреннюю поверхность цилиндрических труб предложено радиальное сверхзвуковое сопло, позволяющее исключить необходимость вращения трубы.

Расчет скорости соударения частиц алюминия различного диаметра при использовании такого сопла показал, что оптимальный размер частиц, при котором удается получить максимальную скорость удара и, соответственно, эффективность напыления, находится в диапазоне 5—10 мкм.

На рис. 73 показан экспериментальный образец, полученный при использовании радиального сопла с диаметром критического сечения 18 мм, диаметром выходного 72 мм, длиной сверхзвукового участка 27 мм. Порошок алюминия (10—40 мкм) напылялся на внутреннюю поверхность трубы при использовании закрученного течения.

В этом же Институте с использованием малопараметрического уравнения состояния для условий высоких температур и давлений



Рис. 73. Образец трубы с внутренним диаметром 80 мм с покрытием из алюминия.

*p*₀ = 1,5 МПа, *T*₀ = 200 °С, генератор закрутки с 32 тангенциальными отверстиями диаметром 1,5 мм.

реализован термодинамический подход для вычисления температурной зависимости механических характеристик металлов, таких как модуль сдвига, коэффициент Пуассона, модуль Юнга и коэффициент объемного расширения. Все упругие механические параметры вычислены без привлечения дополнительных констант. При решении упругопластической задачи использованы уравнения сохранения массы, импульса и энергии, где в правой части уравнений движения стоят градиенты компонент тензора напряжений. При этом девиаторная часть тензора напряжений зависит от механических характеристик, которые являются функциями давления и температуры. Установлено, что с увеличением давления и температуры в материале меняются его упругие характеристики.

Предложив нелинейную зависимость коэффициента Пуассона от давления $\mu = \mu_0 +$

$$+b\sqrt{1-\left(\frac{P-P_{melt}}{a}\right)}$$
 (P_{melt} — давление, при ко-

тором происходит плавление, *а* и *b* — параметры, полученные из условия математической непрерывности кривой), рассчитали продольную скорость звука и получили хорошее соответствие с экспериментальными данными вплоть до температуры плавления. На рис. 74 представлено сравнение расчетных и экспериментальных данных для скорости звука для урана.

По полученным скоростям звука объемной и продольной определены все упругие механические характеристики. На рис. 75 представлены результаты расчета немонотонного поведения модуля сдвига урана, которые обеспечивают правильную асимптотику при достижении температуры плавления.

В том же Институте впервые разработаны физические и теоретические основы и получены приближенные теоретические решения, позволяющие в критериальном виде прогнозировать температуру в контакте частица—основа, а также морфологию, в том числе толщину и диаметр металлокерамических сплэтов, осажденных на подложки при полном контроле ключевых физических параметров: скорость, температура и размер частицы, температура основы, объемная концентрация керамических



Рис. 74. Продольная скорость звука для урана.

включений в расплаве металлической связующей. Выполнена апробация развитых теоретических основ на модельных экспериментальных данных, подтвердившая их работоспособность. Полученные результаты представляют большой теоретический и практический интерес для газотермического, в том числе плазменного, напыления износостойких нано- и субмикроструктурированных покрытий для экстремальных условий эксплуатации из металлокерамических порошков, частицы которых состоят из ультрадисперсных включений высокотвердых химических соединений (WC, TiC, Cr_2C_3 и др.), равномерно распределенных в металлической матрице (Со, Со-Cr, Ni-Cr и др.).

Сотрудниками того же Института разработана двухфазная модель течения крови с переменным по сечению сосуда распределением концентрации эритроцитов. Это позволило объединить в единую модель два, ранее считавшиеся независимыми, свойства течения крови — эффект Фареуса—Линдквиста (уменьшение вязкости крови с уменьшением диаметра кровеносного сосуда) и эффект Фареуса (уменьшение показателя гематокрита крови при уменьшении диаметра кровеносного сосуда) (рис. 75). Показано, что эти эффекты являются следствием концентрации эритроцитов в центре кровеносного сосуда (около стенки образуется безэритроцитный слой плазмы). В модели кровь рассматривается как суспензия, состоящая из плазмы и эритроцитов. Распределение эритроцитов по сечению кровеносного сосуда задается аналитической функцией, зависящей от диаметра сосуда. Модель представлена в виде конечных аналитических формул и достаточно точно описывает экспериментальные данные — по изменению показателя гематокрита определяются зависимость вязкости крови и толщина безэритроцитного слоя.



В том же Институте в результате численного исследования распространения упругих волн в пористой среде, содержащей газ, газовый гидрат или лед, установлено, что импульс полного напряжения распространяется в содержащей гидрат газонасыщенной пористой среде без искажения, с некоторым затуханием. При отсутствии фазовых переходов поведение волн в пористой среде, насыщенной гидратом или льдом, практически не различается. В гидратосодержащей, как и в обычной пористой среде, наблюдается разделение начального импульса на деформационную и фильтрационную моды. При увеличении доли гидрата в порах акустическое сопротивление увеличивается, снижается скорость фильтрационной волны, но увеличивается амплитуда порового давления в деформационной волне (рис. 77). Исследование выполнено в рамках построенной трехскоростной с тремя напряжениями модели при условии отсутствия фазовых переходов. Рассмотрено как распространение волн в бесконечно-протяженной пористой среде, так и



Рис. 76. Зависимость относительной вязкости крови от диаметра сосуда для трех показателей гематокрита крови (0,1, 0,3 и 0,6). Значки — экспериментальные данные из [Pries A.R. et al., 1992], линии результаты расчета по модели.



Рис. 77. Изменение полного напряжения и порового давления при распространении треугольного импульса в пористой среде (материал скелета — кварц), насыщенной метаном (объемное содержание α_h) и газогидратом (объемное содержание α_f).

прохождение и отражение волн через различные границы раздела.

В Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича создана математическая технология, позволяющая на основе клинических данных строить модели верхней части дыхательного тракта человека с учетом индивидуальных особенностей конкретного человека (рис. 78). С помощью этой модели установлено, что на режиме нормального дыхания всегда при вдохе и выдохе формируется закрученный поток с образованием вихрей различной интенсивности, причем его структура зависит от индивидуальных анатомических особенностей полости носа и средней части дыхательного тракта. Наиболее сложная структура потока формируется в окрестности надгортанника, функция которого состоит в перекрытии входа в гортань пищевому кому в процессе глотания (рис. 79).

Сотрудники этого же Института с помощью метода молекулярной динамики провели исследование давления в металлических кластерах сферической формы со свободной поверхностью в интервале величины радиусов r_s^0 от 2 до 10 нм. Для описания межатомного взаимодействия использовался многочастичный потенциал Воутера. Показано, что избыточное давление, рассчитываемое в рамках модели Коши, для криогенных температур обусловлено сжатием кластера поверхностными атомами и его величина с большой точностью



Рис. 78. Математическая модель дыхательного тракта человека, включающая нос, трахею и часть бронхиального дерева, с учетом индивидуальных особенностей.



Рис. 79. Визуализация поля течения по модулю скорости в окрестности надгортанника.



Рис. 80. Зависимость температуры Лапласа от радиуса кластера.

описывается формулой Лапласа. Найденное значение коэффициента поверхностного натяжения составляет $\gamma_0 = 1,867 \text{ Дж/м}^2$. Проведенное численное исследование зависимости давления Лапласа от температуры показало его уменьшение с увеличением температуры за счет «газовой» составляющей давления в твердом теле. Это можно толковать и как уменьшение коэффициента поверхностного натяжения с повышением температуры. Предложено аналитическое выражение

$$\gamma_L(T) = \left(\gamma_0 - \frac{r_s^0 nk}{2}T\right) + \alpha T \left(\gamma_0 - \frac{r_s^0 nk}{2}T\right),$$

описывающее изменение коэффициента поверхностного натяжения от температуры, где α — коэффициент теплового расширения кластеров. Показано, что существует так называемая температура Лапласа

$$T_L = \frac{2\gamma_L^0}{r_s^0 nk}$$

при которой полное давление в кластерах становится равным нулю (рис. 80).

В этом же Институте разработана комплексная феноменологическая и полуэмпирическая модель молекулярной динамики процесса температурного нагружения наночастицы. В рамках молекулярно-динамического подхода предложена полуэмпирическая модель молекулярной динамики, верифицированная по экспериментальной зависимости температуры плавления наночастиц алюминия от их размера. Определены зависимости теплоемкости частицы и теплоты фазового перехода от начального размера и температуры частицы. Показано, что при увеличении размера частицы данные зависимости стремятся к предельным, описывающим параметры частицы в объемной фазе. Сопоставление расчетных характеристик плавления наночастицы алюминия, полученных по модели молекулярной динамики и ранее разработанной феноменологической модели типа Стефана, показало удовлетворительное соответствие полученных данных по времени плавления.