

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

В Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича методом молекулярной динамики решена задача компактирования кластера из четырех наночастиц меди и молибдена в сходящейся ударной волне и его разрушения при растяжении в волне разгрузки. Показано, что компактирование происходит в компоненте меди. Атомы меди заполняют все поровое пространство, а наночастицы молибдена остаются компактными. Разрушение образовавшегося компакта Cu—Mo проис-

ходит также в медной компоненте путем роста пор в волне разгрузки (рис. 58). Обнаружен эффект упрочнения нанокompозитного компакта Cu—Mo по сравнению с компактом, полученным при компактировании восьми наночастиц Cu. Упрочнение нанокompозитного компакта Cu—Mo происходит за счет взаимодействия атомов меди с атомами молибдена.

В том же Институте предложена методика расчета термодинамических свойств наноструктур (калорического и термического урав-

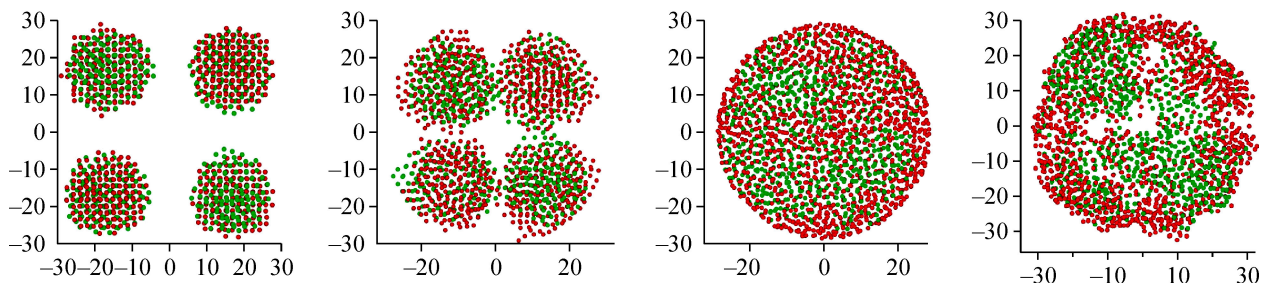


Рис. 58. Результаты расчета компактирования нанопорошка из четырех наночастиц Cu и четырех наночастиц Mo и разрушение образовавшегося нанокompозита Cu—Mo при растяжении наночастицы. Красными кружками показаны атомы Cu, зелеными — атомы Mo.

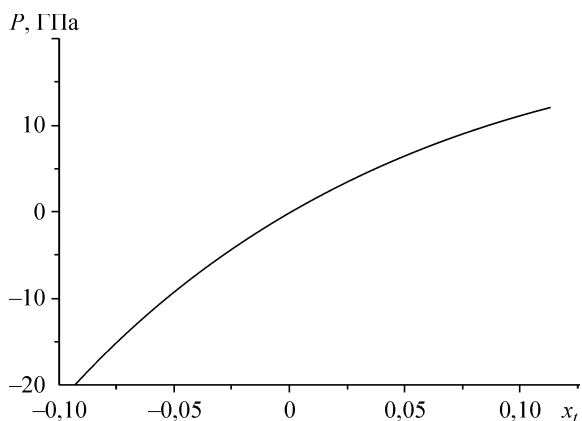


Рис. 59. Зависимость внешнего давления от относительного изменения полного объема для интервала внешних давлений от -20 до 12 ГПа.

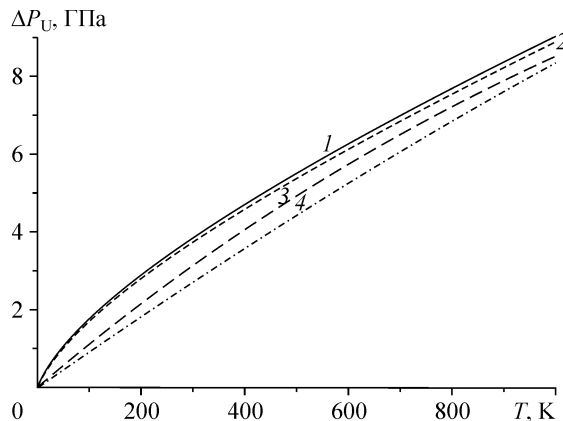


Рис. 60. Зависимость теплового давления в кластере от температуры (случай сжатия) для различных начальных холодных давлений.

1 — $0,1$ ГПа, 2 — 1 ГПа, 3 — 5 ГПа, 4 — 10 ГПа.

нений состояния, рис. 59, 60) методом молекулярной динамики, основанная на первых принципах и альтернативная методу, разработанному в рамках статистической физики. Методика апробирована на примере медных кластеров сферической формы с радиусом 20 \AA . Полученное уравнение состояния позволяет рассчитать константу Грюнайзена γ , которая широко используется в механике сплошных сред (рис. 61). Разработана методика расчета сво-

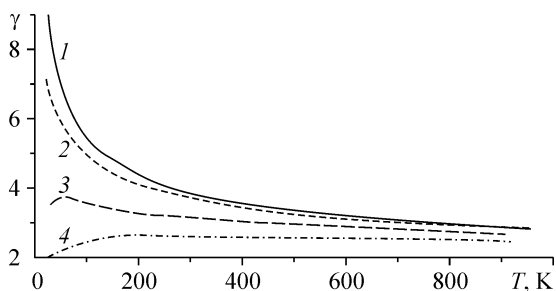


Рис. 61. Зависимость константы Грюнайзена γ от температуры T .

1 — $0,1$ ГПа, 2 — 1 ГПа, 3 — 5 ГПа, 4 — 10 ГПа.

бодной энергии наноструктуры с помощью уравнения Гиббса—Гельмгольца на основе численных результатов, найденных в рамках метода молекулярной динамики.

Дополнительные ограничения, которые необходимо учитывать при анализе термодинамических явлений в наносистемах, связаны с использованием классической механики. При температурах, меньших температуры Дебая, необходимо учитывать квантовые эффекты. Следовательно, выводы, полученные в работе, верны для температур $T \geq \Theta_D$. При высоких температурах этот метод следует сочетать с известными методиками учета влияния электронов на термодинамику системы.

В Тюменском филиале института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича получено уравнение энергии для слоя вблизи линии контакта с учетом влияния неравновесных процессов и дальнедействующих молекулярных сил. Его можно использовать как краевое условие в задачах для уравнения медленного движения слоя вместе с кине-

матическими условиями. В случае, когда неравновесные процессы на линии контакта не существенны, новое уравнение согласуется с ранее полученными краевыми условиями. Для статике слоя теория согласуется с решениями Де Жена. Новое уравнение применено в задаче

динамики слоя жидкости при полном смачивании. Найден эффект изменения структуры течения при увеличении скорости линии контакта: под влиянием неравновесности на микроуровне появляется краевой угол, если скорость превышает критическую.