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

В Институте физики прочности и материаловедения теоретически и экспериментально показано, что в пластической деформации и разрушении нагруженного твердого тела фундаментальную роль играют зоны растягивающих нормальных напряжений, где ослабляются силы межатомных связей, возникают низкочастотные моды в фононном спектре и происходят локальные структурно-фазовые превращения (рис. 45). Распространяясь в полях градиентов касательных напряжений как дефекты исходной кристаллической структуры, они классифицируются как элементарные акты пластического течения, которые могут быть описаны на языке нанокластеров различных атомных конфигураций. Это позволяет описывать деформируемое твердое тело как многоуровневую систему. В физике пластичности предлагается ввести наряду с фактором Шмида (\dot{m}), определяющим проекцию приложенного напряжения на направление сдвига, фактор нормальных напряжений, приведенных к главным осям однородной деформации превращения (n).





Поверхностный слой плоского образца Al999 после интенсивной пластической деформации знакопеременным изгибом; $\alpha = 66^{\circ}$, $\beta = 8^{\circ}$, T = 293 K, $N = 2,9 \cdot 10^{6}$, лазерная профилометрия.

В том же Институте установлено соответствие источников акустической эмиссии и очагов локализации пластического течения на площадке текучести и стадии параболического деформационного упрочнения. Показано, что интенсивность акустической эмиссии при распространении вдоль образца полосы Чернова-Людерса меняется во времени периодически с периодом ~200 с, а координаты мест зарождения неподвижных очагов локализованной деформации на стадии параболического деформационного упрочнения совпадают с положениями максимумов акустической активности при деформации на площадке текучести (рис. 46). Данные о периодичности деформации Людерса подтверждены анализом поведения компонент тензора пластической дисторсии на площадке текучести при деформировании монокристаллов легированного аустенита. Обнаруженное явление указывает на «запоминание» деформируемой средой механического воздействия и наследование локализацией деформации структурных изменений материала, созданных на предыдущем этапе процесса.



Рис. 46. Распределение сигналов акустической эмиссии по деформируемому образцу.

АВ — движение полосы Чернова—Людерса; С, D и Е — положения неподвижных очагов локализованной пластичности на стадии параболического деформационного упрочнения.

Программа 3.6.2. Научные основы создания наноструктурных и нанодисперсных материалов, композиций и покрытий на металлической, керамической и полимерной основах

Решение проблемы термической стабильности сверхтвердости наноструктурных и нанокомпозитных покрытий имеет решающее значение для их использования в качестве защитных инструментальных покрытий. В Институте физики прочности и материаловедения установлено, что в исследованных покрытиях систем Ті-Si-B-C-O-N и Ті-Si-Al-C-O-N наблюдается кристаллическая фаза TiN в наноструктурном (размер зерен менее 20 нм) или двухуровневом (размер зерен сотни нанометров, фрагментированных на нанозерна размером 10-20 нм, и нанокристаллическое состояние с равноосными зернами размером менее 20 нм) зеренных состояниях. Кристаллическая фаза TiN распределена в рентгеноаморфной фазе, объемная доля которой составляет 25-50 %.

Показано, что наноструктурные состояния (рис. 47) и сверхтвердость (35,0—48,7 ГПа) указанных покрытий с высоким содержанием кислорода и углерода сохраняются до температур отжига $T \le 1273$ К. Сделано заключение, что высокие прочностные свойства покрытий обусловлены наличием дислокационной субструктуры и высоким сопротивлением сдвигу рентгеноаморфных фаз по границам кристаллитов TiN.

Проведено молекулярно-динамическое исследование зарождения пластической деформации на примере монокристаллов меди в широких интервалах температур и условий нагружения. Показано, что зарождение пластической деформации начинается с термофлуктуационного формирования локальных структурных изменений, которые названы протодефектами. Обнаружено существование пороговой деформации, при достижении которой происходит скачкообразный рост протодефектов (рис. 48). Генерации протодефектов предшествует локальное увеличение атомного объема. Показано, что при глубоких степенях деформации «конденсация» протодефектов может приводить к формированию разориентированных наноразмерных блоков (рис. 49).

Полученные результаты открывают возможность с новых позиций рассматривать зарождение и развитие пластической деформации кристаллических материалов.

Проведенные экспериментальные исследования и компьютерное моделирование разрушения пористых керамических образцов со стохастической структурой порового пространства показали, что на характер накопления повреждений и тип разрушения (хрупкий или вязкий) принципиально влияет не само наличие пористости, ее величина и средний размер пор, а распределение пор по размерам (дисперсия). При этом, с одной стороны, существует дисперсия, при которой размер пор при прочих равных условиях минимален, а с другой, система, составленная из хрупких фраг-



Рис. 47. Темнопольное электронно-микроскопическое изображение микроструктуры (*a*) и картина микродифракции (*б*) покрытия системы Ti–Si–B–N после напыления и последующего отжига в вакууме при *T* = 1273 К.



Рис. 48. Зависимость доли атомов, вовлеченных в локальные структурные перестройки (*n*), от степени деформации є для температур, К: *1*—100, *2*—300, *3*—500, *4*—700.



Рис. 50. Зависимость прочности образцов от дисперсии площади контактов по слоям образца, перпендикулярным к направлению нагружения.



Рис. 49. Проекция фрагментированной структуры кристаллита на плоскость (111) при деформации ~20 % (крупные темные кружки соответствуют атомам с изменившейся конфигурацией соседей).

ментов, при механическом нагружении может проявлять как хрупкий характер разрушения, так и квазивязкий, когда разрушение происходит за счет множественного накопления микроповреждений. Это полностью согласуется с экспериментальными данными, показывающими, что при деформации пористой системы происходит ее разделение на две подсистемы, по-разному деформирующиеся при приложении нагрузки — упруго и квазивязко. Зависимость прочности такой системы от дисперсии площади контактов между структурными элементами носит пороговый характер, причем есть область, где прочность постоянна, а выше некоторого значения дисперсии она уменьшается экспоненциально (рис. 50).

Программа 3.6.3. Механика деформирования и разрушения однородных и композитных материалов и конструкций для транспортных и авиационных систем

В Институте гидродинамики им. М. А. Лаврентьева развиты алгоритмы численных решений задач деформирования и потери устойчивости наноструктур в рамках уравнений молекулярной механики. Численно получено решение новых по выпучиванию углеродных нанотрубок, сжатых по оси (рис. 51).

В том же Институте методом Л. В. Овсянникова найдены новые точные решения уравнений идеальной пластичности Треска.



Рис. 51. Формы колебаний сравнительно короткой нанотрубки в окрестности точки квазибифуркации (первая форма соответствует форме выпучивания нанотрубки при динамическом деформировании), над формами колебаний приведены значения частот & (обороты/пс).

Предложен новый способ перфорации зоны пласта нефтяной скважины и различные кумулятивные устройства для его осуществления.

В Институте вычислительного моделирования выполнен анализ особенностей напряженно-деформированного состояния корпуса верхнего оголовка несущей стрелы стартового комплекса запуска ракет. Определены компоненты напряжений и деформаций корпуса оголовка при заданных расчетных (проектных) и аварийных нагрузках. Установлено, что при некоторых сочетаниях проектных нагрузок, а также при возникновении аварийных перегрузок не обеспечиваются требуемые коэффициенты запаса прочности конструкции (рис. 52).

В Институте физико-технических проблем Севера проведена серия испытаний на растяжение плоских образцов из оргстекла с надрезом на универсальной разрывной машине Instron при температурах +20 °C и –40 °C для выявления условий ветвления трещины. Найдено условие перехода трещины к режиму ветвления (рис. 53).



Рис. 52. Зоны высоких напряжений в элементе конструкции.



Рис. 53. Схематическое изображение механизмов образования ветвления трещины.

Программа 3.6.4. Механика гетерогенных сред и нанотехнологии

В Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича впервые рассчитаны из первых принципов, без использования феноменологических предположений, молекулярно-динамическим методом термическое и калорическое уравнения состояния наноструктур на конкретном примере медного нанокластера. Показана возможность использования предложенного метода для расчета



Рис. 54. Зависимость твердости по Бринеллю монокристаллической меди. *R* — радиус, *h* — глубина погружения индентора. *R*, нм: 1 (*I*), 2 (*2*), 5 (*3*), 10 (*4*).

уравнения состояния макроструктур, необходимого в механике сплошных сред.

В том же Институте показано, что для инденторов радиусом менее 10 нм твердость по Бринеллю нанопленки меди не является универсальной характеристикой, а возрастает с уменьшением радиуса индентора и уменьшается с увеличением глубины погружения (рис. 54). Это обусловило необходимость создания нового критерия твердости на наномасштабном уровне.

ИТПМ совместно с Институтом химии твердого тела и механохимии предложен новый метод получения полых сферических частиц порошков металлов и сплавов, в том числе модифицированных тугоплавкими керамическими наночастицами. В основе метода лежит высокоэнергетическая мехактивация (МА) исходного порошка металла или сплава, в том числе его объемное модифицирование (МА + + М) тугоплавкими керамическими наночастицами в центробежно-планетарной мельнице и последующая плазменная обработка полученного порошка в контролируемой аргоновой атмосфере. Вскрыты особенности плазменной обработки полученных порошков. Обнаружено, что нагрев и последующее плавление частиц в плазме аргона приводят к образованию внутри капель газовой полости (рис. 55), а конечный диаметр и толщина оболочки затвердевших частиц зависят от предыстории обработки МА или МА + TiC/TiN — частиц в аргоновой плазменной струе и скорости их закалки. При этом количество остаточного газа в затвердевшей полой сфере определяется динамикой процесса его фильтрации из порового объема твердой частицы на стадии нагрева в плазме до момента образования поверхностной пленки расплава.

Исследовано формирование сплэтов — растекшихся и затвердевших полых капель Ni и CoNiCrAlY при их соударении с полированными подложками из нержавеющей стали. Для этого выполнены модельные эксперименты при полном контроле ключевых физических параметров: скорость, температура, размер полой частицы и толщина ее оболочки; температура подложки. Показано, что формирование сплэтов при соударении таких капель с подложкой, по сравнению с плотными каплями той же массы и скорости, носит более стабильный характер (см. рис. 55, II), что обеспечивает плотную границу раздела покрытие-подложка и, соответственно, высокие функциональные характеристики покрытий.

Полученные результаты представляют значительный интерес для газотермического (плазменного, детонационного, газопламенного и др.) нанесения покрытий.

В Институте теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича впервые предложено газодинамическое конструирование трехмерных пространственных структур с помощью холодного газодинамического напыления (ХГН). Формирование трехмерных пространственных структур осуществляется с помощью создания устойчивых вихревых образований в сверхзвуковой части сопла, которые изменяют распределение концентрации дисперсной фазы в двухфазном потоке по сечению сопла и, тем самым, обеспечивают заданную форму напыляемого пятна на подложке до получения требуемой трехмерной структуры (рис. 56). Вихревые образования внутри сопла могут создаваться с помощью воздействия на поток как раздельно, так и совместно различ-



Рис. 55. Морфология частиц CoNiCrAlY, прошедших плазменную обработку, закаленных в жидкость (*a*) и после соударения с полированной подложкой из нержавеющей стали (*б*).

I — исходный порошок; II — прошедший механообработку; III — прошедший механообработку и модифицирование наночастицами TiC.

ных возмущающих газодинамических факторов: закрутка потока на входе в сопло, вдув в сопло через пористый насадок на срезе сопла или через продольные щели (пропилы) вблизи среза сопла и др. Показано, что вихревые структуры при натекании на напыляемую поверхность способствуют разрушению ударной волны (сжатого слоя) и, следовательно, улучшают процесс напыления.



Рис. 56. Примеры трехмерных структур при ХГН с вариацией возмущающих факторов и вихревых образований в сопле.