

## Основные научные результаты, полученные в 2007 году

### *Фундаментальная роль локальных зон растягивающих нормальных напряжений в пластической деформации и разрушении твердых тел*

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. 1.1.1). 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 ( $\bar{m}$ ), определяющим проекцию приложенного напряжения на направление сдвига, фактор нормальных напряжений, приведенных к главным осям однородной деформации превращения ( $\bar{n}$ ).

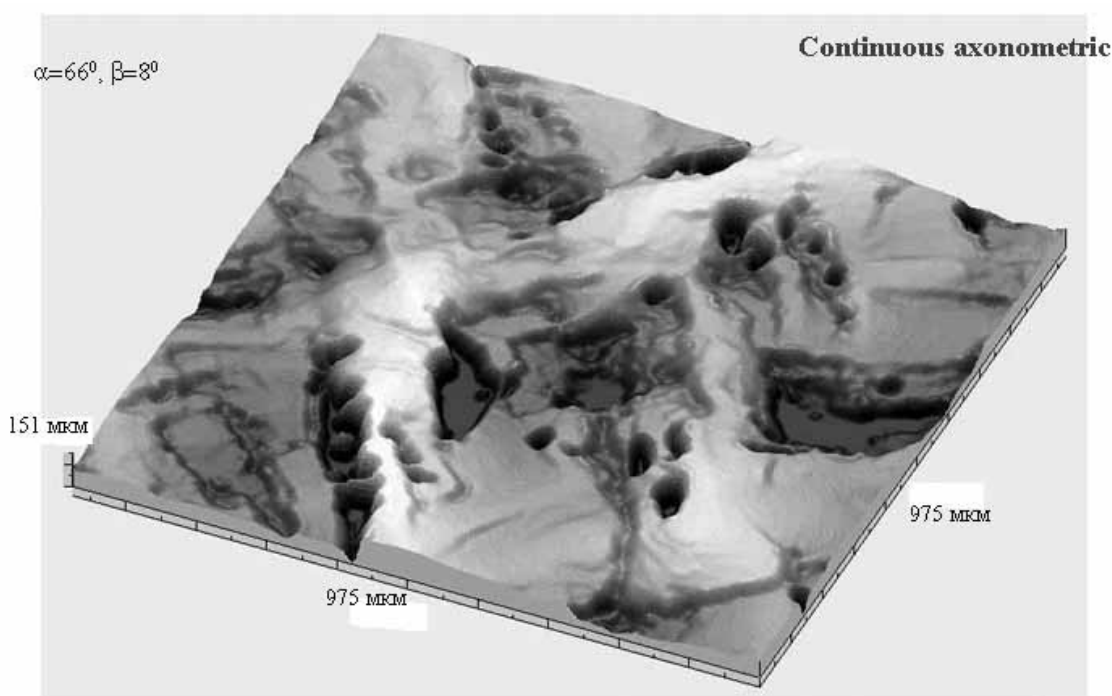


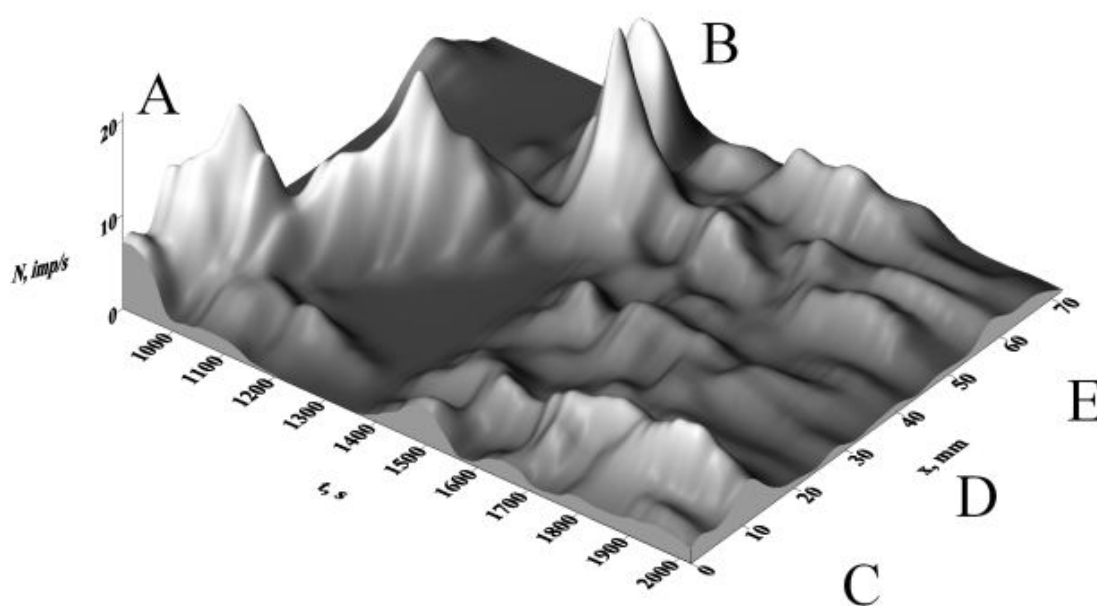
Рис. 1.1.1 Эффекты экструзии материала в зонах растягивающих нормальных напряжений. Поверхностный слой плоского образца А1999 после интенсивной пластической деформации знакопеременным изгибом;  $T=293\text{K}$ ,  $N=2,9 \times 10^6$ , лазерная профилометрия

### *Периодическое изменение акустической активности внутри очага локализованной пластичности*

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  $\sim 200$  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. 1.1.2). 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. 1.1.2 Распределение сигналов акустической эмиссии по деформируемому образцу. АВ – движение полосы Чернова-Людерса; С, D и E – положения неподвижных очагов локализованной



пластичности на стадии параболического деформационного упрочнения

### ***Термически стабильные сверхтвёрдые наноструктурные и нанокомпозитные защитные инструментальные покрытия***

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

Показано, что наноструктурные состояния (рис. 3) и сверхтвёрдость (35,0 ÷ 48,7 ГПа) указанных покрытий с высоким содержанием кислорода и углерода сохраняются до температур отжига  $T \leq 1273$  К. Сделано заключение, что высокие прочностные свойства покрытий обусловлены наличием дислокационной субструктуры и высоким сопротивлением сдвигу рентгеноаморфных фаз по границам кристаллитов TiN.

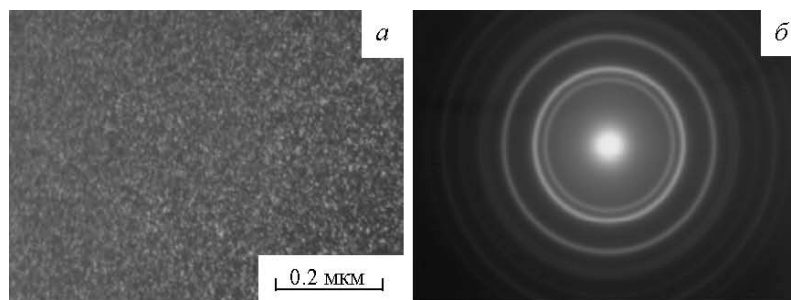


Рис. 1.1.3 Темнопольное электронно-микроскопическое изображение микроструктуры (а) и картина микродифракции (б) покрытия системы Ti-Si-B-N после напыления и последующего отжига в вакууме при  $T = 1273 \text{ K}$

### *Атомные механизмы нанофрагментации кристаллов при глубоких степенях деформации*

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. 1.1.4). Генерации протодефектов предшествует локальное увеличение атомного объема. Показано, что при глубоких степенях деформации «конденсация» протодефектов может приводить к формированию разориентированных наноразмерных блоков (рис. 1.1.5).

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

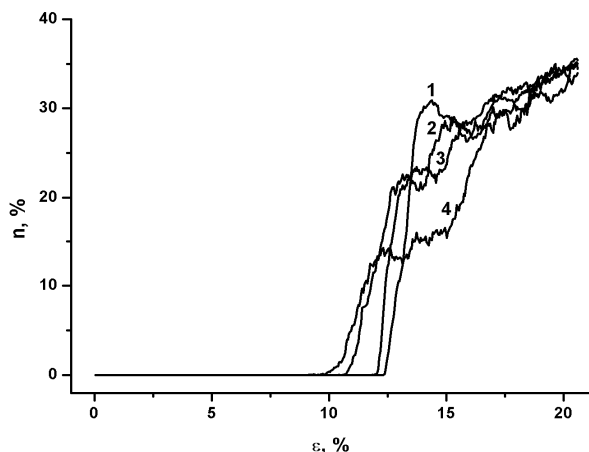


Рис. 1.1.4 Зависимость доли атомов, вовлеченных в локальные структурные перестройки ( $n$ ), от степени деформации  $\epsilon$  для температур: 1 – 100 K, 2 – 300 K, 3 – 500 K, 4 – 700 K.

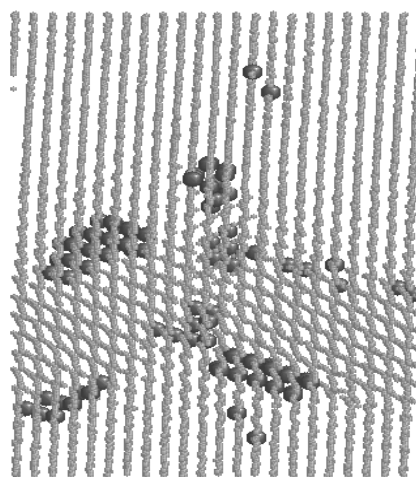


Рис. 1.1.5 Проекция фрагментированной структуры кристаллита на плоскость (111) при деформации  $\sim 20\%$  (крупные темные кружки соответствуют атомам с изменившейся конфигурацией соседей).

### *Прочность пористых керамических материалов со стохастической структурой порового пространства*

Проведенные экспериментальные исследования и компьютерное моделирование разрушения пористых керамических образцов со стохастической структурой порового пространства показало, 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 стороны, – система, составленная из хрупких фрагментов, при механическом нагружении может проявлять как хрупкий характер разрушения, так и квазивязкий, когда разрушение происходит за счет множественного накопления микрповреждений. 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. 1.1.6).

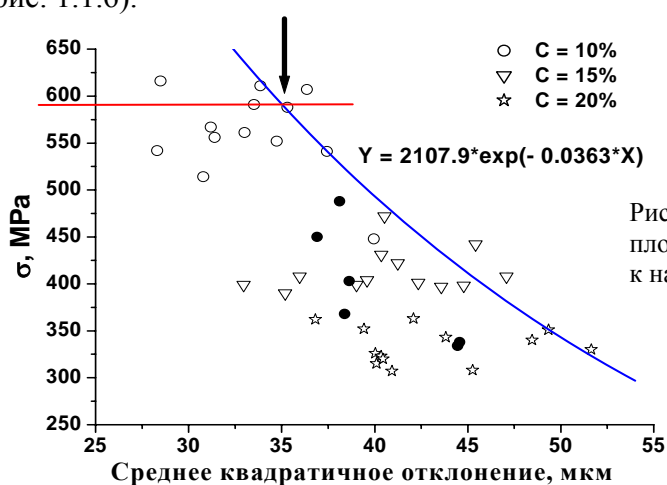


Рис. 1.1.6 Зависимость прочности образцов от дисперсии площади контактов по слоям образца, перпендикулярным к направлению нагружения

### ***Влияние межзеренных границ на особенности зарождения пластической деформации в кристаллитах при механическом нагружении***

В рамках метода молекулярной динамики исследовано влияние симметричных наклонных границ на особенности зарождения пластической деформации в кристаллитах. Исследование проводилось применительно к кристаллитам меди с наклонными симметричными границами  $\Sigma 5$  и  $\Sigma 11$ .

Впервые показано, что релаксация сдвиговых напряжений осуществляется генерацией локальных структурных изменений – протодефектов, которые возникают в области межзеренных границ. Существует пороговая величина деформации, зависящая от интенсивности нагружения, температуры, типа границ и других факторов, по достижении которой начинается скачкообразный рост протодефектов и их согласованное «прорастание» вглубь зерен вдоль определенных кристаллографических направлений (рис. 1.1.7). При этом формируются структурные дефекты более высокого ранга: частичные дислокации, дефекты упаковки и т.п. (рис. 1.1.8).

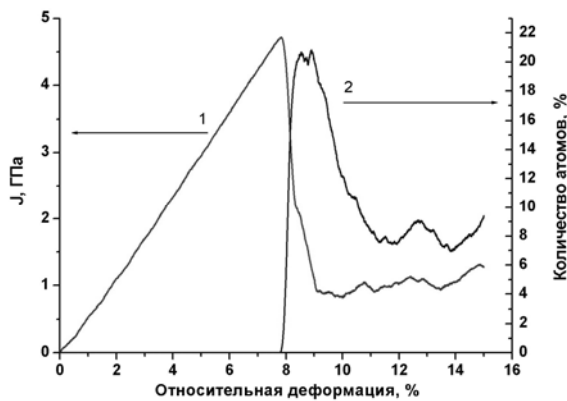


Рис. 1.1.7 Зависимость интенсивности сдвигового напряжения (1) и количества атомов (2) в областях с локальными структурными изменениями (протодефектами) от деформации для кристаллита с границей зерна  $\Sigma 5$ . Скорость деформации  $10^9 \text{ c}^{-1}$

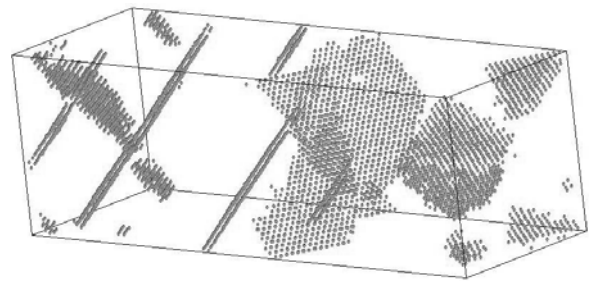
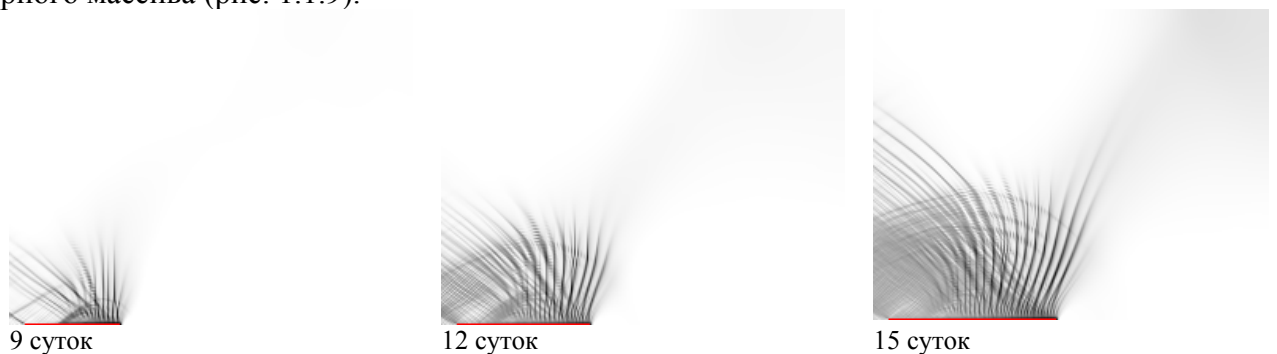


Рис. 1.1.8 Структура кристаллита с границей зерна  $\Sigma 5$ , деформированного на величину 8,25 % одноосным растяжением с сохранением объема. Показаны только те атомы, у которых изменилась кристаллографическая конфигурация ближайших соседей

### ***Деформация и разрушение геоматериалов и геосред как нелинейных динамических систем***

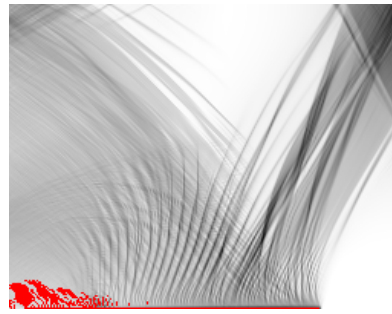
Развит эволюционный подход к моделированию процессов деформации и разрушения твердых тел и сред, рассматриваемых как иерархически организованные нелинейные динамические системы. Установлен принцип фрактальной делимости твердых тел, в том числе геосред, согласно которому разрушение начинается с межатомных расстояний и продолжается вплоть до размеров тектонических плит. Образующиеся иерархии масштабов деструкции (блоков) являются мультифрактальными структурами.

Показано что нелинейная система уравнений механики сплошных сред вместе с эволюционными определяющими уравнениями первой и второй группы описывает как этап медленной квазистационарной фазы эволюции, так и сверхбыструю катастрофическую фазу, которая соответствует разрушениям на соответствующих масштабах. Развитый подход позволил описать неупругую деформацию и катастрофическое разрушение реальных геосред в реальных геологических временах. Задача эволюции геосреды в поле сил тяжести была протестирована на примере моделирования катастрофических обрушений кровли над выработанным пространством в шахтах. Определены основные параметры модели (скорости накопления повреждений, деградация прочностных характеристик) и проведены расчеты для различных условий движения забоя и геологических характеристик горного массива (рис. 1.1.9).





20 суток



27 суток – достигнут конец забоя



28 суток – обвал основной кровли позади забоя развивается в катастрофическом режиме

Рис. 1.1.9 Формирование в кровле системы полос локализованных повреждений и иерархии блоков. Длина расчетной области 256 м, забоя 200 м (нижняя грань, начиная слева), скорость движения забоя 4 м/сутки