

1. Краткое изложение важнейших результатов исследований, завершенных в 2009 году, по программам фундаментальных исследований СО РАН за 2007-2009гг.

Физическая мезомеханика и неравновесная термодинамика наноструктурных состояний

В Институте физики прочности и материаловедения СО РАН с участием Института биохимии СО РАН теоретически и экспериментально обосновано существование особого класса двухфазных наноструктурных состояний в конденсированных средах. Они возникают в сильно неравновесных твёрдых телах вблизи нуля их термодинамического потенциала Гиббса как предпереходные состояния «нанокристаллы-аморфные прослойки» (рис. 1.1). 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.

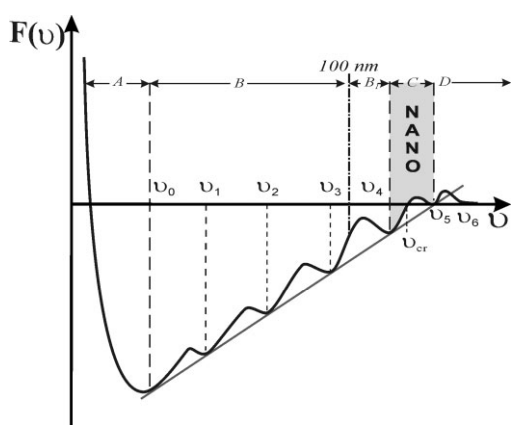


Рис. 1.1. Зона С предпереходных наноструктурных состояний на фазовой диаграмме зависимости термодинамического потенциала Гиббса $F(v)$ от молярного объёма v вблизи $F(v)=0$.

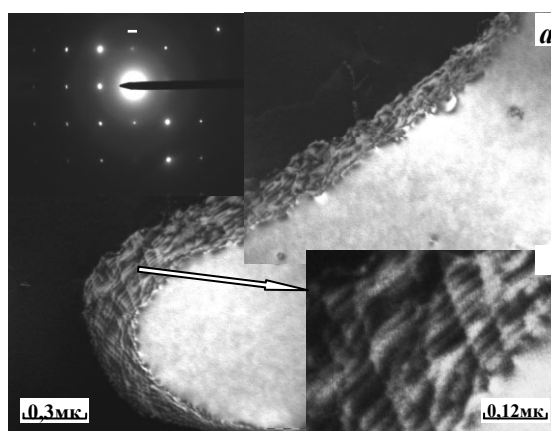
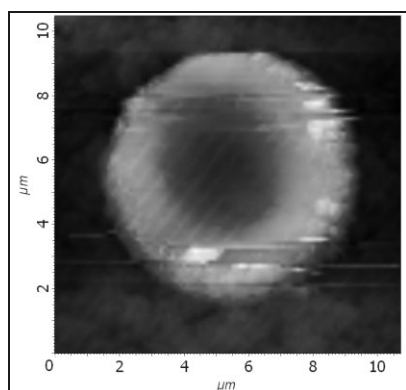
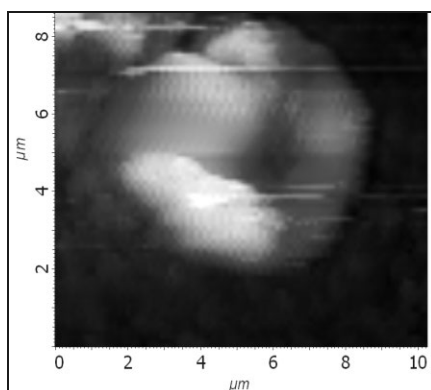


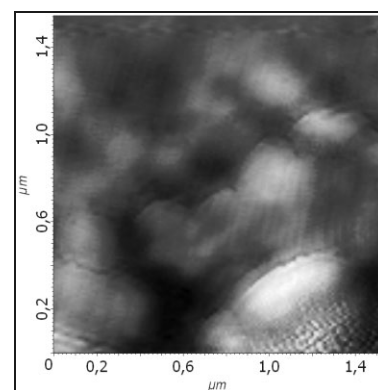
Рис. 1.2. Обнаружение неизвестных ранее подвижных наноструктурных фазовых границ субзерен в сильно неравновесных средах, эффективно релаксирующих концентраторы внутренних напряжений. Эффект используется в «умных покрытиях» (smart coating)



а)



б)



в)

Рис. 1.3. Стадии изменения структуры эритроцита при взаимодействии с солями тяжёлых металлов: исходная структура (а), её фрагментация (б) и полная деградация (в).

В полях внешних воздействий или при введении наномодификаторов в среде с наноструктурными состояниями возникают локальные структурно-фазовые 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. 1.2). При закритических внешних воздействиях фрагментация среды с наноструктурными состояниями выходит на макромасштабный уровень, становится необратимой и завершается деградацией структуры и свойств исходной среды (рис. 1.3).

Разработаны практические рекомендации в области наноинженерии тонких плёнок (создание smart coating) и влияния внешних воздействий на биологические мембраны.

Дисперсия автоволн локализованного пластического течения

На основании рассмотрения деформируемой среды как активной нелинейной системы получено теоретическое объяснение квадратичного закона дисперсии автоволн локализованного пластического течения, наблюдаемых на стадиях легкого скольжения и линейного деформационного упрочнения. Экспериментально и теоретически установлены условия существования максимумов и минимумов дисперсионных кривых, отвечающих различным механизмам деформационного упрочнения моно- и поликристаллов. Показано, что из уравнения дисперсии следует существование инварианта для упругой и пластической деформации среды.

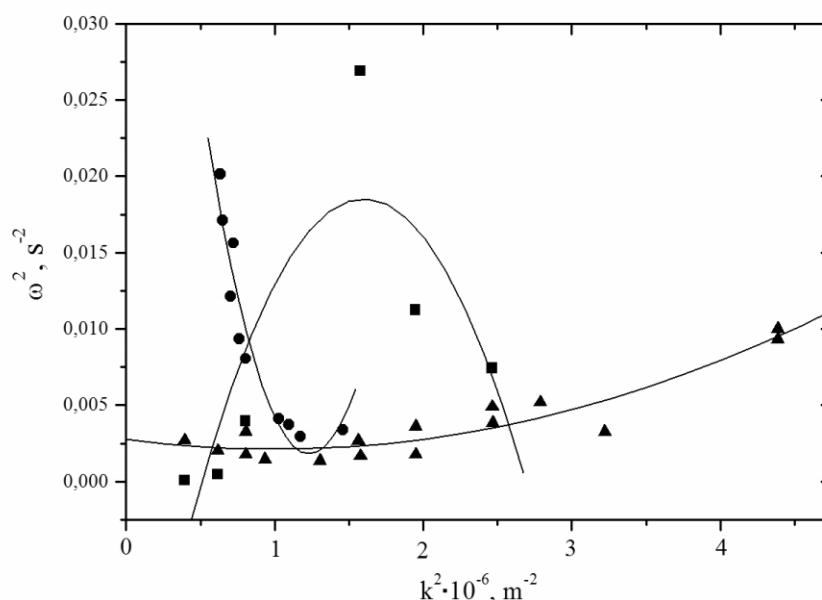


Рис. 1.4. Квадратичные дисперсионные соотношения для автоволн локализованного пластического течения. Линии – теоретические кривые, точки соответствуют разным материалам

Градиенты напряжений в нанокристаллах – источник высокой кривизны кручения решетки

С использованием методики темнопольного электронно-микроскопического анализа впервые обнаружена высокая кривизна-кручение решетки и внутренние упругие напряжения в нанокристаллической фазе нанокомпозитных сверхтвердых покрытий. При этом обнаруживается широкий спектр значений кривизны от нулевых до 300 град/мкм во всем изученном (до 20 нм) интервале значений размеров областей когерентного рассеяния нанокристаллитов нитрида титана. Выполнена оценка величины (до $E/200$, E – модуль Юнга) напряжений в нанокристаллах, и получены данные об их высокой (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.

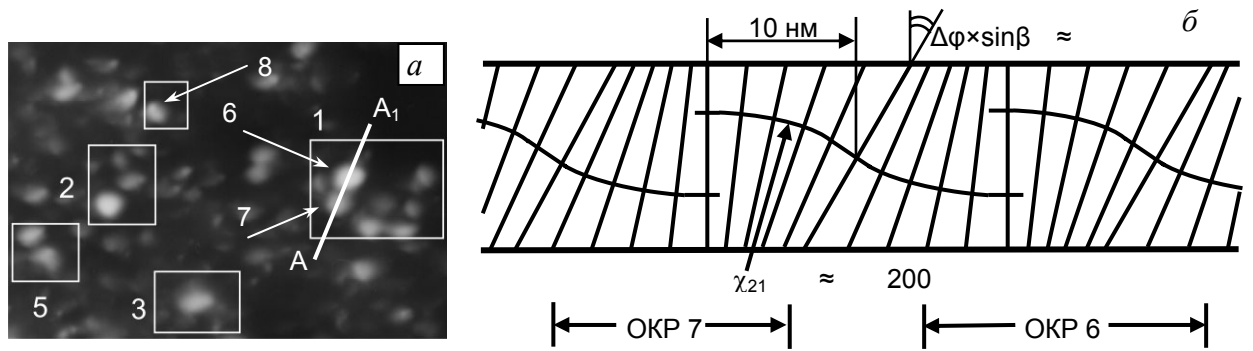


Рис. 1.5. Фрагмент темнопольного анализа изгиба-кручения кристаллической решётки отдельных нанокристаллов в сечении AA₁ покрытия Ti-Si-B-N (а) и соответствующая схема дипольного изменения ориентации отражающих плоскостей (б)

Закономерности деформационного поведения ультрамелкозернистых материалов

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 обеспечивает 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.

Полученные фундаментальные результаты позволяют целенаправленно выбирать технологические параметры того или иного метода интенсивной пластической деформации для получения материала конкретного назначения с заданной микроструктурой и комплексом эксплуатационных характеристик.

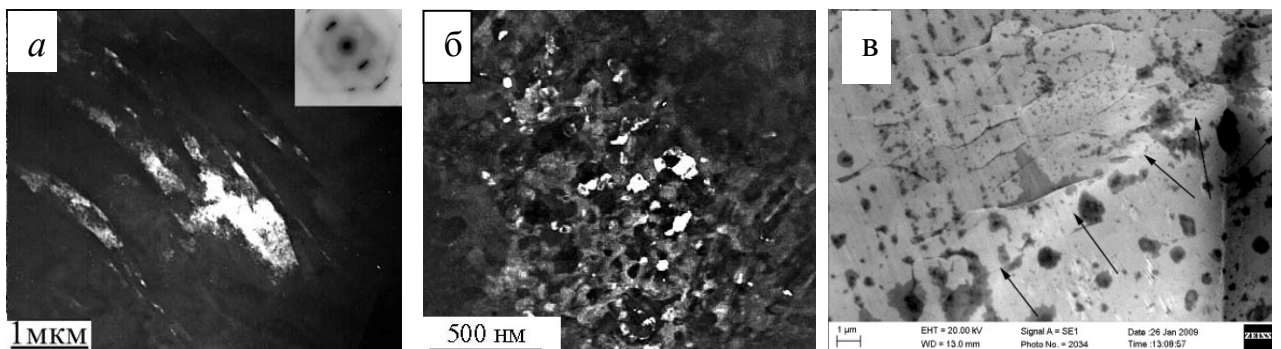


Рис. 1.6. а – микрополосы локализованной деформации в никелиде титана после abc-прессования; б – нанозерна в микрополосах локализованной деформации; в – деформационный рельеф вокруг отпечатка индентора, свидетельствующий о развитии зернограницного проскальзывания в чистом субмикроструктурном алюминии при комнатной температуре. Стрелками показаны границы отпечатка

Перколяционные переходы в стохастической поровой структуре керамики

При моделировании методом подвижных клеточных автоматов в трёхмерной постановке и экспериментальном изучении механических свойств пористой керамики со стохастическим распределении 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. Эти данные являются фундаментальным подтверждением положения о принципиально немонотонной зависимости физических свойств пористых сред от строения порового пространства при стохастическом распределении пор.

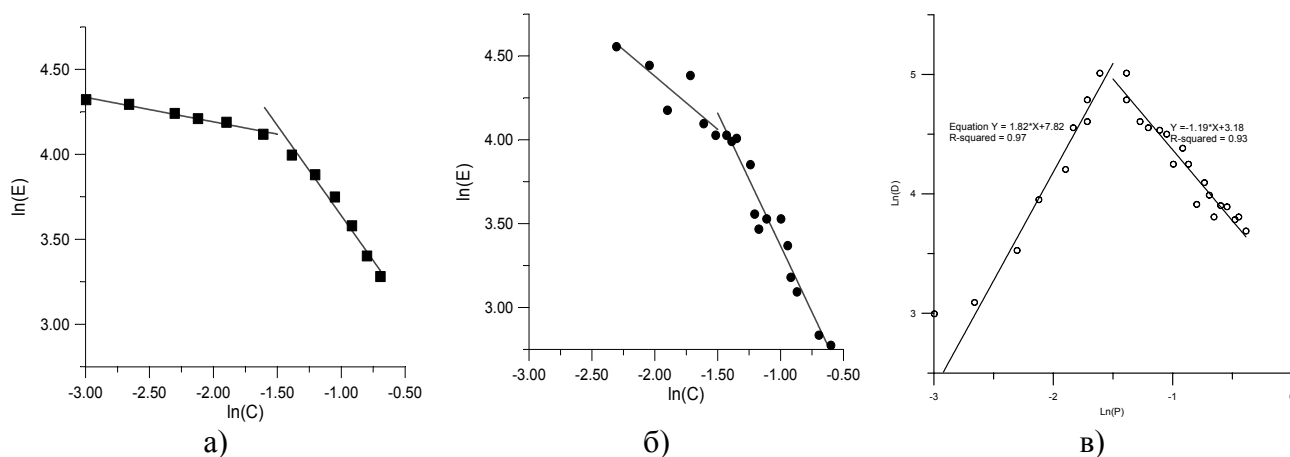


Рис. 1.7. Зависимости в двойных логарифмических координатах упругого модуля керамики (а – данные расчётов, б – экспериментальные данные) и размеров кристаллитов в керамике (в) от пористости

Нелинейный отклик геоматериалов и геосред в условиях стесненной деформации

Показано, что в условиях сдвигового деформирования блочной геологической среды важным фактором, определяющим относительный вклад деформационных механизмов различного ранга в интегральный отклик, является степень неравносности сжатия.

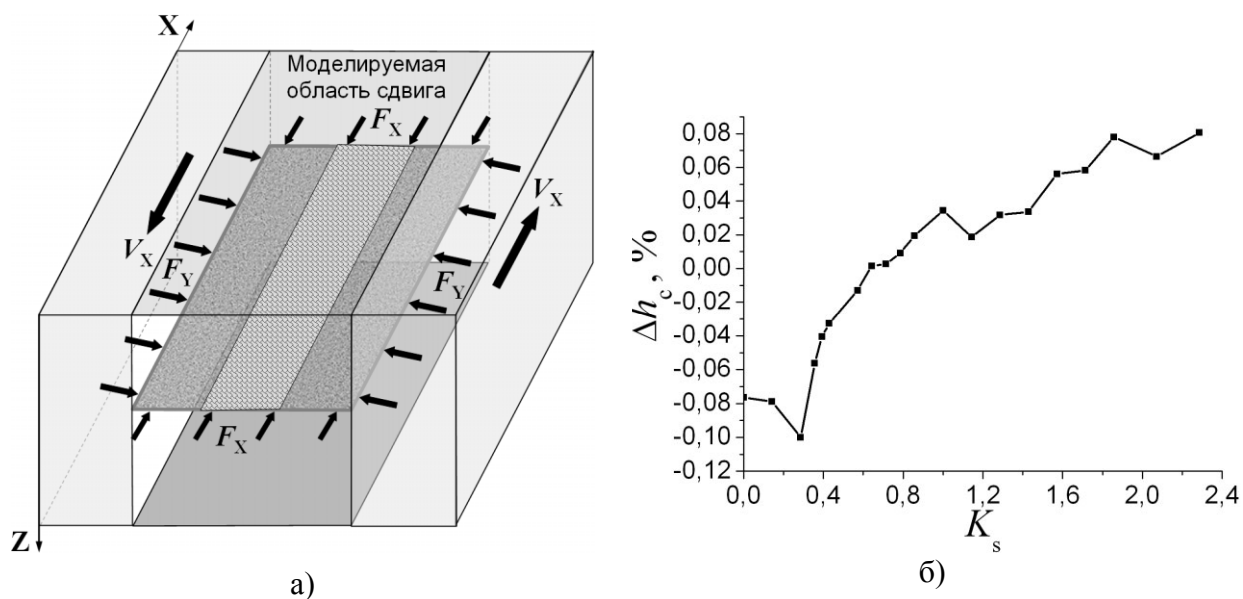


Рис. 1.8. Схема нагружения области сдвига в блочной геосреде (а) и зависимость относительной величины уширения Δh_c области сдвига от параметра неравносности сжатия $K_s = F_x/F_y$ (б)

При больших степенях стеснения доминирующим деформационным механизмом становится формирование «мезоскопических» повреждений и их объединение в межблочные трещины, что может приводить к возрастанию коэффициента дилатансии среды в несколько раз.

Атомные механизмы зарождения пластической деформации в ГЦК решетке при механическом нагружении

Обнаружено, что зарождение пластической деформации в кристаллите начинается с лавинообразного роста локальных структурных изменений (протодефектов), формирующихся при достижении пороговой величины деформации, которая зависит от температуры кристаллита и наличия в нем границ раздела. При этом, формирование протодефектов обусловлено атомными перестройками на первой и второй координационных сферах, приводящих к изменению взаимного расположения атомов ближайшего окружения. Расчёты показали, что генерации локального структурного изменения предшествует локальное увеличение атомного объёма в области его формирования на величину, сравнимую со скачком объёма при плавлении. Показано, что генерация в деформируемом кристаллите дефектов упаковки, частичных дислокаций, микродвойников, нанофрагментации связана с эволюцией системы протодефектов. На основании проведенных исследований можно заключить, что обнаруженный протодефект может быть рассмотрен как элементарный носитель пластической деформации в нагружаемом ГЦК кристаллите, определяющий развитие в нем дефектной структуры.

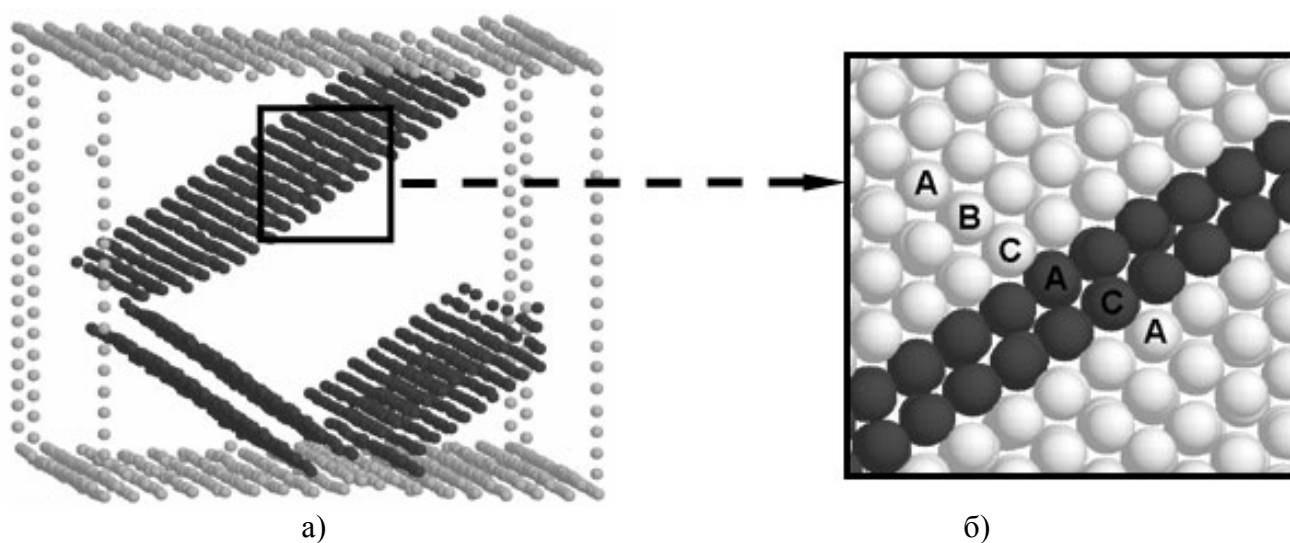


Рис. 1.9. Структуры, сформированные протодефектами (выделены красным цветом), а – после релаксации; б – структурный фрагмент, содержащий дефект упаковки