

# ПУТЬ В ГЛУБИНЫ ТВЕРДОГО ТЕЛА

*На стыке физики, механики, химии и материаловедения развивается новое научное направление – физическая мезомеханика материалов, описывающая деформируемое твердое тело как иерархически организованную дефектную систему, внутри которой в полях внешних воздействий самосогласованно развиваются процессы на нано-, микро-, мезо- и макромасштабном уровнях. Разработанный научный аппарат и полученные фундаментальные знания применяются для конструирования материалов нового поколения и создания неразрушающих методов их диагностики и контроля, используются в электронике, катализе и биологии*

**В** Российской академии наук материаловедческие институты проходят по отделению химии и наук о материалах. Такое соседство не случайно. Исторически материаловедение было прерогативой химиков, открывших основные элементы периодической системы их великого коллеги Д. И. Менделеева.

Однако пришло время, когда новые материалы стали конструироваться на базе фундаментальных представлений физики, механики, химии, биологии, математики, информатики с использованием современных компьютерных технологий. В Сибирском отделении Академии наук такую перспективу хорошо видели изначально.

К середине прошлого века на базе Томского государственного университета и созданного при нем Сибирского физико-технического института сложилась крупная научная школа физиков-материаловедов, в которой на основе физики и механики деформируемого твердого тела развивались новые материаловедческие подходы, позволившие выйти на компьютерное конструирование



ПАНИН Виктор Евгеньевич – действительный член РАН, профессор, доктор физико-математических наук. Советник РАН.

Создатель мультидисциплинарного научного направления – физической мезомеханики материалов.

Организатор Института физики прочности и материаловедения СО РАН (Томск). Автор и соавтор более 600 научных трудов, включая 12 монографий, 39 патентов и авторских свидетельств на изобретения.

Лауреат Премии им. академика В. А. Коптюга (2002) и Премии им. академика М. А. Лаврентьева (2010)

**Ключевые слова:**

мультидисциплинарность, физика, механика, наноструктурное материаловедение, деформация, разрушение.

**Key words:** multidisciplinary approach, physics, mechanics, nanomaterials science, deformation, fracture



материалов. Большую поддержку в этой работе оказывал Институт прикладной математики и механики при ТГУ, располагавший хорошей вычислительной базой.

В результате такого сотрудничества в материаловедении появилось новое междисциплинарное направление, окончательно сформировавшееся в Институте физики прочности и материаловедения СО РАН и известное сегодня в научном мире как *физическая мезомеханика материалов*.

### Между микро- и макро-

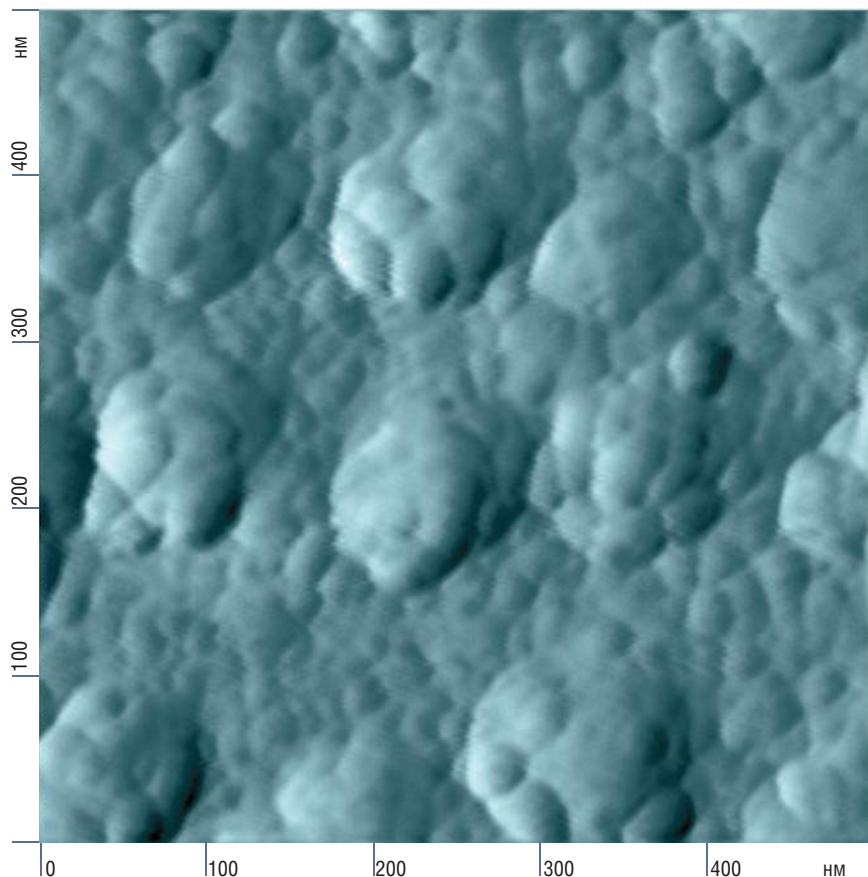
Проблемы пластичности и прочности конструкционных материалов долгое время рассматривались исключительно в рамках механики сплошной среды, позволявшей решать широкий круг инженерных задач на макромасштабном уровне. Однако материаловеды хорошо понимали, что макромеханические характеристики связаны с внутренней структурой материала, влияющей на механизмы пластического сдвига, зарождение трещин и разрушение материала. Решение подобных проблем было уже прерогативой физиков, исследовавших процессы деформации и разрушения на уровне кристаллической структуры твердых тел.

Теоретические модели этих явлений разрабатывались физиками до середины XX в., когда произошел подлинный прорыв в микромир в результате использования просвечивающей электронной микроскопии при исследовании тонкой структуры кристалла. Обнаружение дефектов кристаллической структуры, названных *дислокациями*, стало революцией в физике твердого тела, определившей развитие науки о пластичности и прочности твердых тел на следующие полвека. Выяснилось, что именно поведение дислокаций, возникающих под действием приложенного к кристаллу напряжения, определяет его пластическую деформацию.

Вслед за этим перед теоретиками встала новая задача – рассчитать поведение сложных дислокационных ансамблей в деформируемом твердом теле и связать их с макромеханическими характеристиками. Однако все подобные попытки оказались безуспешными. Четверть века назад томские ученые доказали принципиальную невозможность прямого перехода от теории дислокаций к механике сплошной среды (от микромасштабного структурного уровня сразу к макромасштабному). Более того, было показано, что для корректного описания трансформации внутренней структуры деформируемого твердого тела необходимо

В процессе нагрева двух сопряженных разнородных сред на поверхности их раздела возникает «шахматное» распределение чередующихся зон сжимающих и растягивающих нормальных напряжений, но только в зонах растягивающих напряжений возникают атомные перераспределения и процессы локального массопереноса. Проявление эффекта «шахматной доски» на тонкой пленке меди, напыленной на плоский образец титана, после термического отжига при температуре 723 К в течение часа.

Атомно-силовая микроскопия

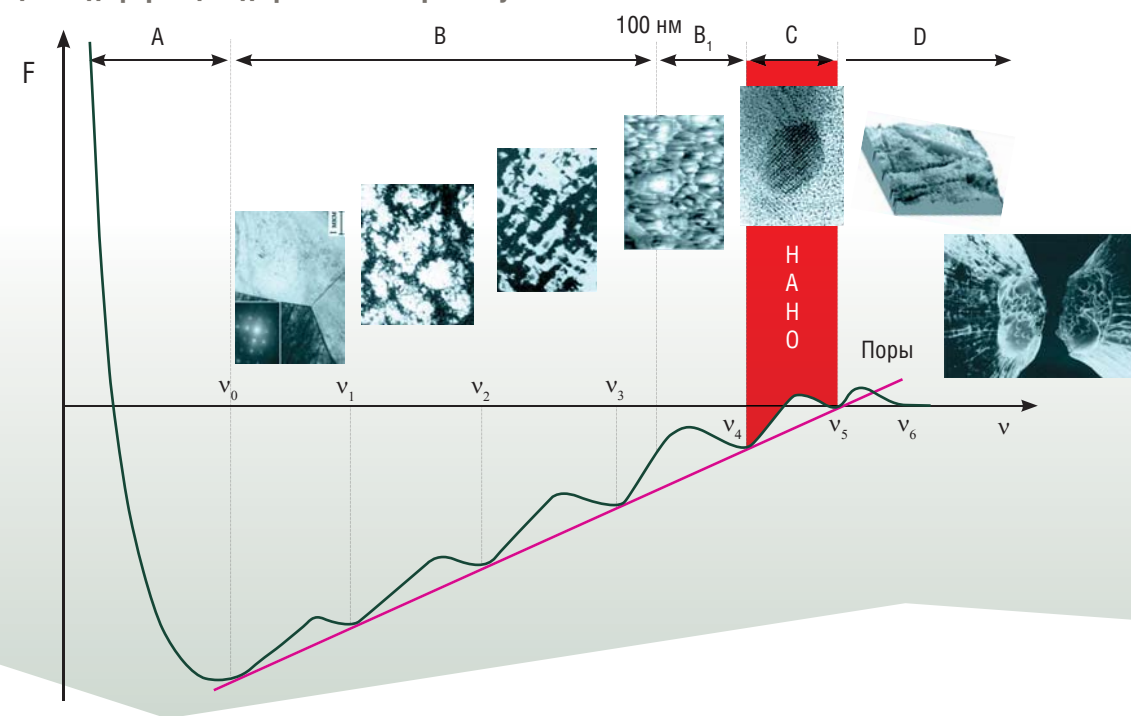


### НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ ФИЗИЧЕСКОЙ МЕЗОМЕХАНИКИ

Недеформированный кристалл стабилизирован строгой периодичностью своей кристаллической решетки и имеет в этом состоянии минимум термодинамического потенциала Гиббса  $F(v)$ , который соответствует равновесному молярному объему  $v=v_0$ . Появление деформационных дефектов повышает термодинамический потенциал и выводит кристалл из состояния термодинамического равновесия. Любая система стремится минимизировать свой термодинамический потенциал, поэтому в деформируемом кристалле происходит самоорганизация дефектов, ведущая к его структурной фрагментации. В процессе деформации дефекты самоорганизуются

в метастабильные субструктуры, соответствующие локальным минимумам  $F(v)$  в точках  $v_1, v_2, \dots, v_n$  при этом масштаб фрагментации структуры кристалла измельчается по мере увеличения интегральной плотности дефектов.

Важно отметить, что для описания поведения фрагментированного кристалла вместо сложных дислокационных ансамблей можно использовать уравнения мезомеханики. Движение отдельных дислокаций учитывается как аккомодационный процесс на основе полевой теории дефектов.



Зависимость термодинамического потенциала Гиббса от молярного объема материала с учетом локальных зон гидростатического растяжения различного масштаба, в которых развиваются деформационные дефекты (A – область гидростатического сжатия; B – область макро-, мезо- и микромасштабных структур; B<sub>1</sub> – область наномасштабных структур; C – область наноструктурных состояний; D – область пористости и разрушения)

Деформируемое твердое тело представляет собой иерархически организованную дефектную систему, самосогласованно развивающуюся на макро-, мезо-, микро- и наномасштабном уровнях. Поверхностный слой и внутренние границы раздела являются ее важными функциональными подсистемами, где зарождаются пластические сдвиги и разрушение материала. Иерархическое самосогласование всех масштабов деформационных дефектов, включая трещины, описывается на основе зависимости термодинамического потенциала Гиббса от молярного объема материала с учетом локальных зон гидростатического растяже-

ния, где зарождаются дефекты. Образование трещин в таких зонах обусловлено возникновением в них наноструктурных состояний, которые характеризуются наличием квазиаморфных прослоек с положительным термодинамическим потенциалом Гиббса. Наномасштабному уровню отводится базовая роль в определении природы структурных превращений, связанных с образованием деформационных дефектов. С приближением  $F(v)$  к нулю в неравновесном материале возникают двухфазные предпереходные наноструктурные состояния, составляющие основу наноинженерии.

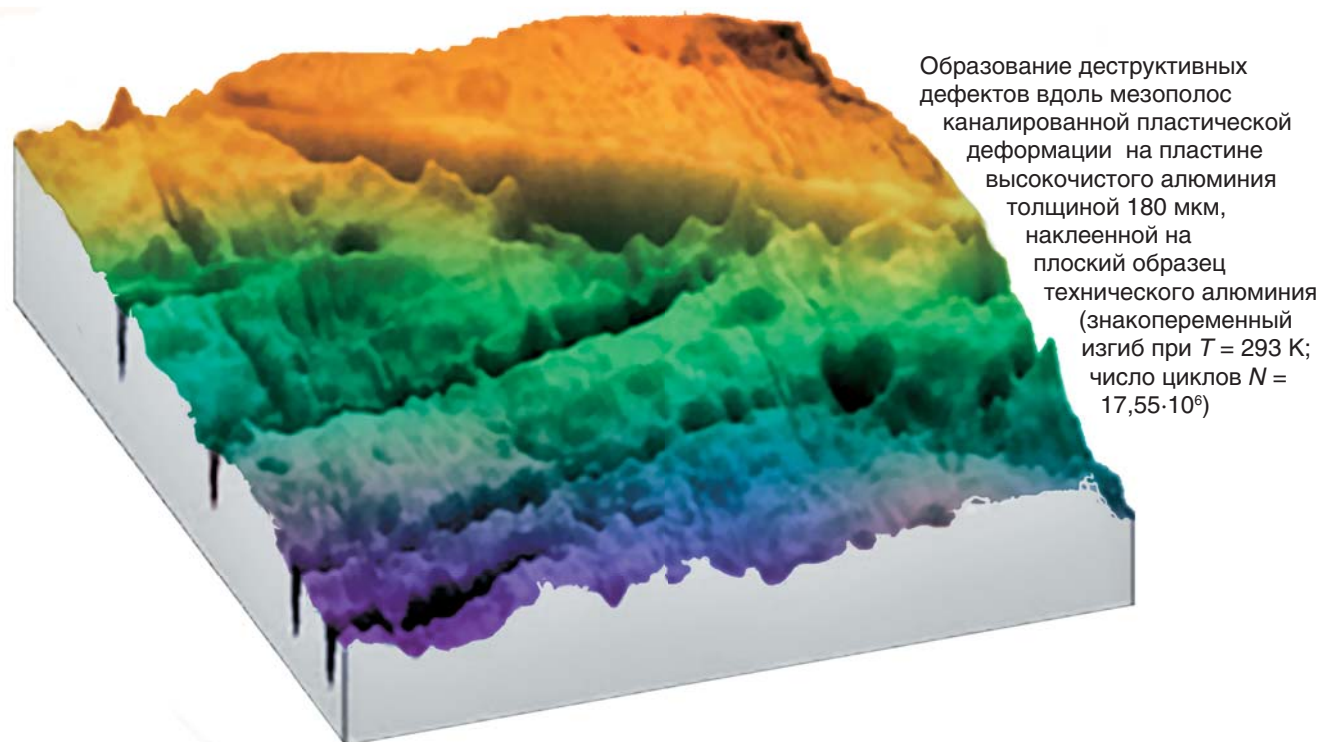
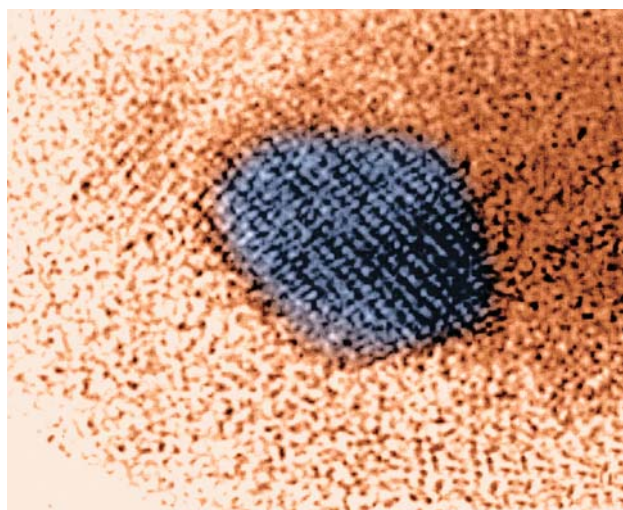


### ПОЧЕМУ И КАК РАЗРУШАЕТСЯ МАТЕРИАЛ

Разрушение нагруженного кристалла имеет физико-механическую основу. Механика определяет критическую зону гидростатического растяжения с наноструктурными состояниями и положительным термодинамическим потенциалом Гиббса в квазиаморфных прослойках. Неравновесная термодинамика обуславливает разрушение конденсированного состояния материала в этой зоне с образованием трещины или поры.

Любая система нормально функционирует только в рамках той структуры, которая отведена ей природой. Нарушение структуры и функциональных возможностей системы неизбежно приводит к ее полной деградации. В этом плане общность термодинамической природы эволюции дефектной подсистемы в деформируемом кристалле и развитие онкологической болезни в живом организме совершенно очевидна. Прораствание фрагментируемого кристалла дефектными прослойками в процессе деформации подобно метастазам раковой опухоли. При определенной концентрации дефектных прослоек значение термодинамического потенциала, соответствующее локальной стабилизации кристалла, становится положительным. В таком состоянии кристалл существовать не может: в дефектных прослойках развиваются поры и несплошности, приводящие к его разрушению. Другими словами, растущая плотность дефектов ведет к увеличению молярного объема и неравновесности деформируемого кристалла, обрекая его на разрушение.

Появление квазиаморфных прослоек вокруг нанокристаллов размером 30 нм, связанное со структурными изменениями материала в зоне его разрушения. На фото – вещество, извлеченное из пластической зоны царапины на монокристалле апатита. Просвечивающая электронная микроскопия



введение целой иерархии промежуточных мезомасштабных структурных уровней.

Физическая мезомеханика материалов пошла по пути использования неравновесной термодинамики для описания дефектных подсистем разномасштабных уровней и полевой теории дефектов в деформируемом твердом теле. В современном наноструктурном материаловедении альтернативы такому подходу не существует.

### Новая наука – новое знание

Использование подходов физической мезомеханики к изучению механических свойств различных материалов радикально продвинуло представления ученых о пластичности и прочности твердых тел. Отметим ряд основополагающих результатов, полученных в этой области при представлении деформируемого твердого тела в виде самосогласованной многоуровневой системы.

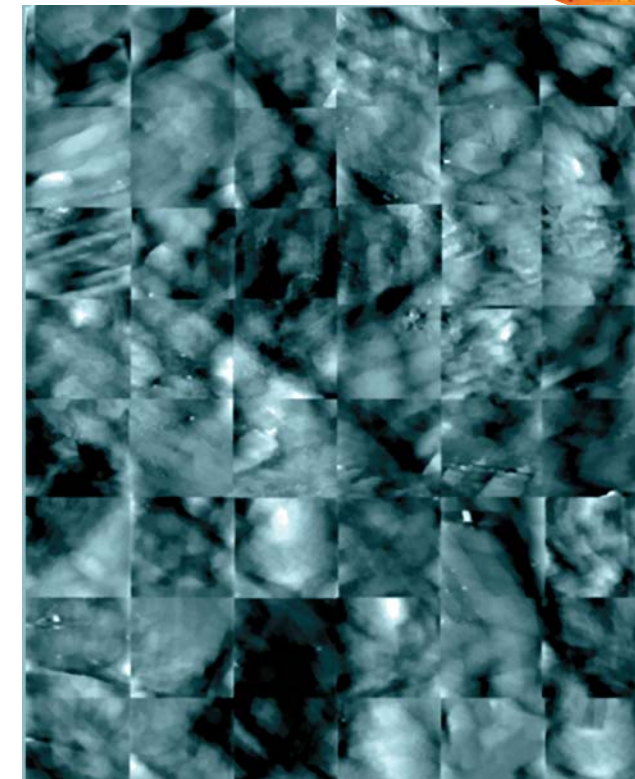
1. Деформационные дефекты не могут возникать в однородно нагруженном равновесном кристалле из-за невозможности в нем локальных структурных превращений. Все виды деформационных дефектов зарождаются в локальных зонах гидростатического растяжения различного масштаба, возникающих в неоднородном поле внутренних напряжений при любом виде нагружения (растяжении, сжатии, изгибе, кручении и т. д.).

2. Волновая природа потоков дефектов на микро- и мезомасштабном уровнях системы обуславливает корпускулярно-волновой дуализм пластических сдвигов в деформируемом твердом теле.

3. На границе раздела двух значительно различающихся по составу и(или) структуре материалов системы возникает «шахматное» распределение чередующихся зон сжимающих и растягивающих нормальных напряжений. Однако только в зонах растягивающих нормальных напряжений могут зарождаться пластические сдвиги. Это объясняет локализацию пластического течения, наблюдаемую на различных масштабных уровнях (эффект каналирования пластической деформации).

4. При возникновении на границе раздела покрытия и кристаллической подложки эффекта «шахматной доски» потоки поверхностных дефектов распространяются только по зонам гидростатического растяжения, формируя полосы локализованной деформации в виде двойных спиралей, где зарождаются усталостные трещины.

5. Эффект «шахматной доски» особенно сильно проявляется при деформации многослойных покрытий, приводя их к постепенному разрушению под воздействием внешних полей (тепловых, механических, электромагнитных и др.).



Каналированные пластические сдвиги в виде двойной спирали в наноструктурированном поверхностном слое ферритно-мартенситной стали ЭК-181 (растяжение  $\epsilon = 10\%$ ). Сканирующая туннельная микроскопия

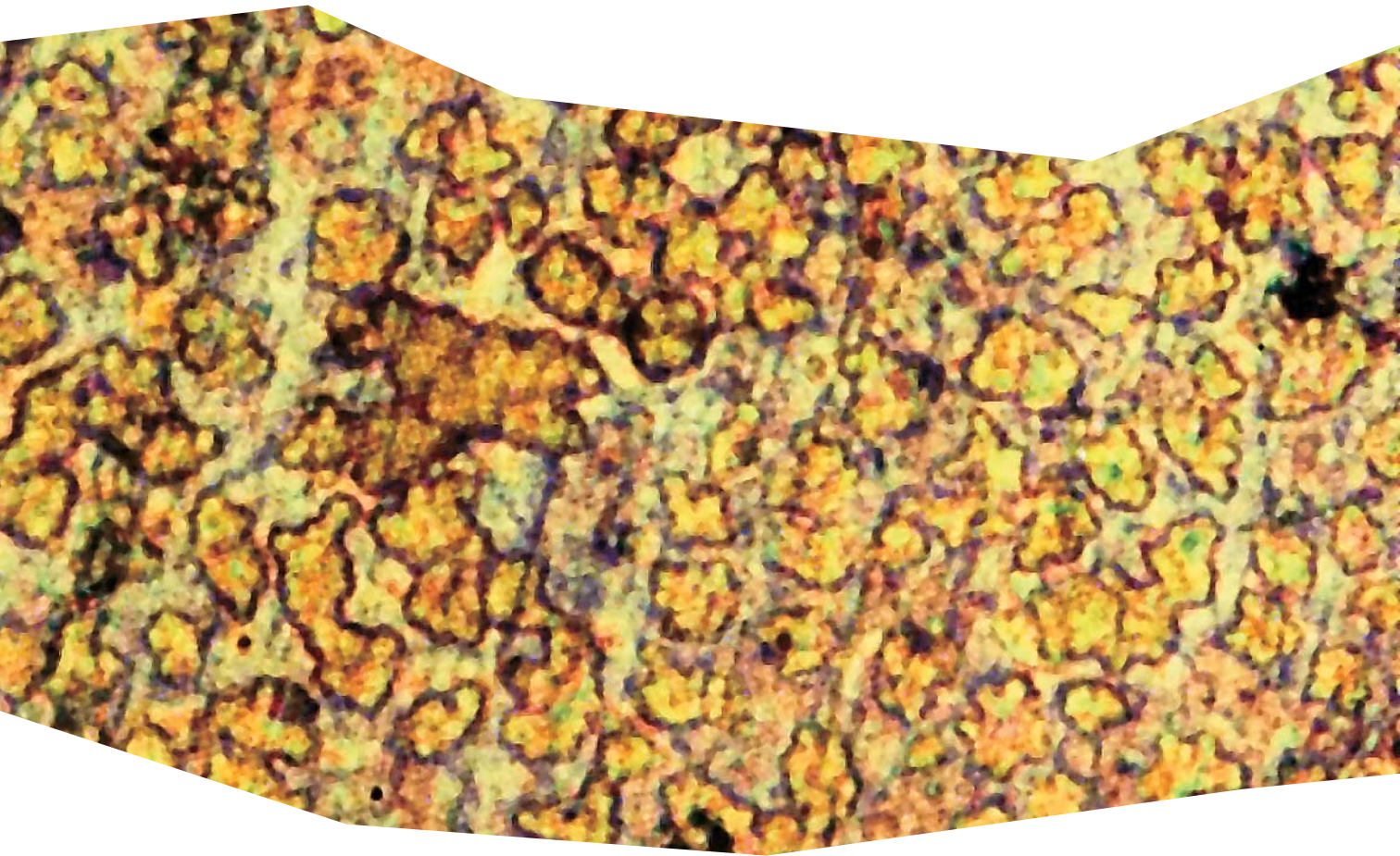
### Материальные плоды

В 2007 г. коллектив ученых из Московского государственного индустриального университета, Центрального НИИ химии и механики, ИФПМ СО РАН получил диплом на открытие «Явление взаимного массопереноса контактирующих твердых металлических веществ при импульсном воздействии». По сути, это означает признание нового направления в создании неизвестных прежде композиционных материалов из несмешивающихся компонентов, которое может быть обосновано только с помощью физической мезомеханики.

«НАУКА из первых рук» уже писала об исследованиях в области высокоэффективных теплозащитных покрытий для сопла ракетного двигателя, проводившихся учеными из ИФПМ СО РАН и Исследовательского центра им. М. В. Келдыша (Москва). Теперь этим коллективом созданы новые «умные покрытия» (*smart coatings*), в которых термические напряжения способны обратимо реагировать на изменения параметров плазменного потока.

Эффект «шахматной доски» на границах раздела разнородных сред успешно используется в совместной работе ученых и самолетостроителей для повышения усталостной прочности конструкционных материалов





В результате высокоэнергетического импульсного воздействия твердый материал приходит в сильновозбужденное наноструктурное состояние, позволяющее вводить целые фрагменты инородного вещества внутрь материала без нарушения его сплошности.  
*На фото* – фрагмент листа алюминия с включением меди и вольфрама, иллюстрирующий проникновение одного твердого материала в другой при подведении энергии в зону их контакта с помощью электрического импульса. *Световая микроскопия*

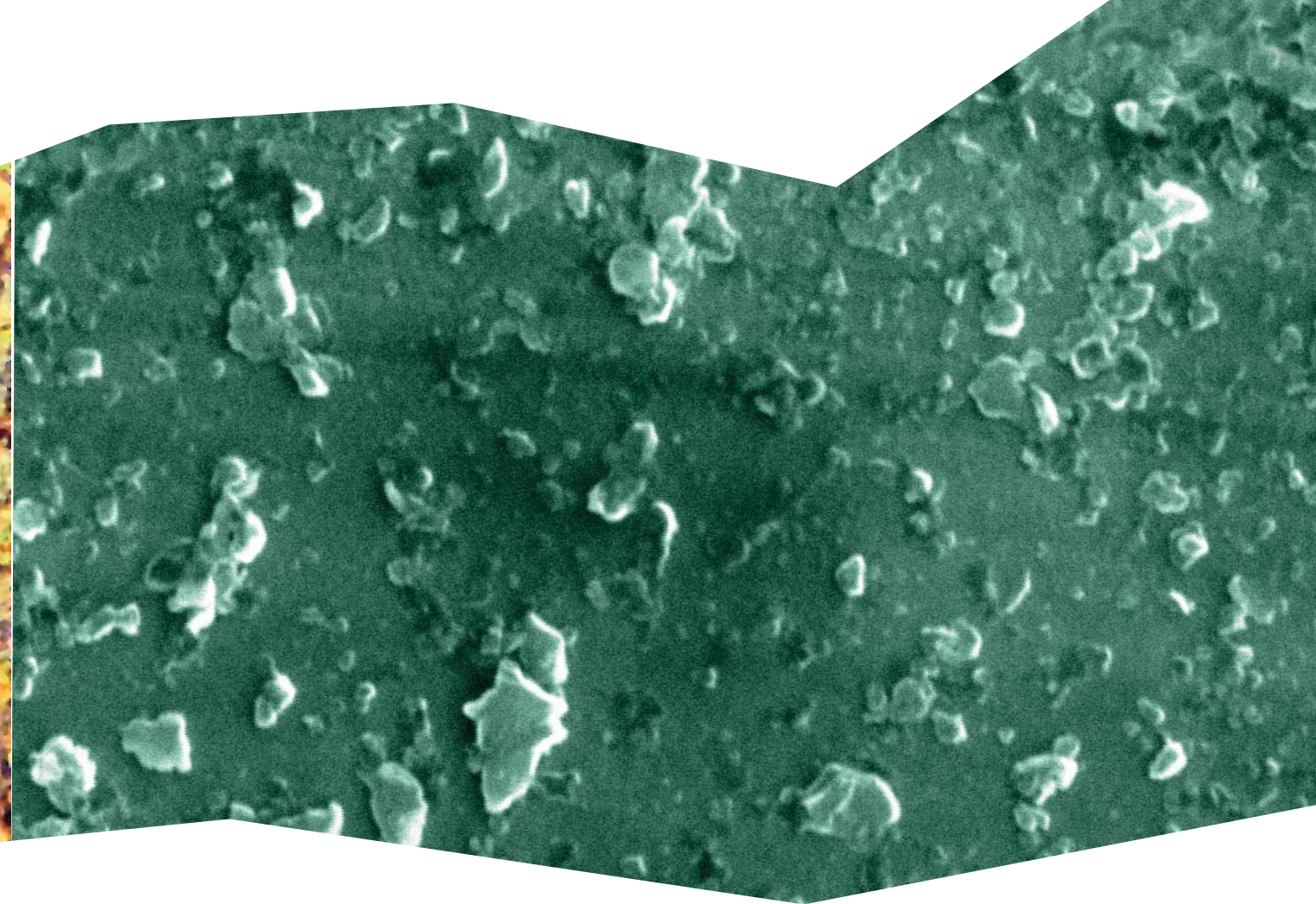
и их сварных соединений. В поверхностном слое циклически нагружаемой конструкции возникают замкнутые петли канализированной пластической деформации, которые, согласно упомянутому эффекту, проходят по клеткам с растягивающими нормальными напряжениями. Чем крупнее эти клетки, тем больше диаметр петель и тем раньше в них начинают развиваться трещины усталостного разрушения.

Превентивное наноструктурирование поверхностного слоя конструкционного материала позволяет существенно измельчить структуру «шахматного» распределения напряжений в этой области и задержать развитие усталостного разрушения конструкции.

С развитием нанотехнологий все большее внимание уделяется созданию новых материалов путем «сборки

снизу», когда наночастицы с аморфной оболочкой специальными методами консолидируются в объемные наноструктурные материалы. Физическая мезомеханика показывает, что на поверхностях трения также создаются условия для образования наночастиц и их консолидации «сборкой снизу».

Частицы износа на поверхностях трения образуются в результате высокоэнергетических воздействий на материал. Это позволяет в контролируемых условиях трения формировать наночастицы износа заданного состава и консолидировать их в поверхностном слое материала. Таким образом, в ходе изнашивания происходит «самоупрочнение» конструкции за счет образования в ее поверхностном слое частиц тугоплавких и высокопрочных соединений.



С помощью подходов, разработанных в рамках физической мезомеханики, можно конструировать износостойкие поверхности трения путем формирования нужного по составу и структуре поверхностного слоя.

*На фото* – субмикроструктурные и наноструктурные частицы высокопрочных соединений карбидов ванадия и титана, выделенные на поверхности трения стали ШХ15 с высокохромистым чугуном, легированном ванадием и титаном. *Световая микроскопия*

Сегодня в наноструктурном материаловедении исключительно актуальна проблема создания неразрушающих способов диагностики и контроля, поскольку используемые для этих целей традиционные промышленные технологии неприменимы к наноматериалам в силу их малой пластичности и термодинамической нестабильности. Эти работы проводятся ИФПМ СО РАН совместно с ОКБ Сухого также на основе физической мезомеханики материалов.

#### Литература

Панин В.Е., Панин А.В., Моисеенко Д.Д. «Шахматный» мезоэффект интерфейса в гетерогенных средах в полях внешних воздействий // *Физическая мезомеханика*. 2006. Т. 9, № 6. С. 5–15.

Панин В.Е., Егорушкин В.Е. Неравновесная термодинамика деформируемого твердого тела как многоуровневой системы. Корпускулярно-волновой дуализм пластического сдвига // *Физическая мехомеханика*. 2008. Т. 11, № 2. С. 9–30.

Панин В.Е., Егорушкин В.Е. Физическая мезомеханика и неравновесная термодинамика как методологическая основа наноматериаловедения // *Физическая мехомеханика*. 2009. Т. 12, № 4. С. 7–26.

*Physical mesomechanics of heterogeneous media and computer-aided design of materials / Ed. by V.E. Panin.- Cambridge: Cambridge Interscience Publishing, 1998. 339 p.*

Чайкина М.В. *Механохимия природных и синтетических апатитов*. Новосибирск: Изд-во СО РАН, филиал «ГЕО». 2002. 218 с.

Панин В.Е., Сергеев В.П. *Наноструктурные покрытия: эффект «шахматной доски»* // *НАУКА из первых рук*. 2007. № 2. С. 42–44.

Панин В.Е., Сергеев В.П. *Нано для космоса* // *НАУКА из первых рук*. 2009. № 3. С. 18–19.