

ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ XXI ВЕКА

Новосибирский государственный технический университет

Показано, что материаловедение, как междисциплинарная наука, развивается на основе новейших достижений физики конденсированного состояния, механики упругого, пластического деформирования и разрушения, синергетики и нелинейной динамики сложных, самоорганизующихся систем.

Фундаментальные исследования и практические разработки новых материалов на базе фрактальной геометрии реальной структуры имеют единую парадигму на макро-, мезо- и микроструктурных уровнях. Основная проблематика современного материаловедения включена в перечень критических технологий Российской Федерации.

К началу XXI века в традиционной, фундаментальной науке произошли заметные перемены. Взамен анализа и дробления наук, на смену детерминизма, линейности, обратимости и континуальности приходит синтез наук, осознание реальности структур, синергетика эволюции сложных, нелинейных, динамических систем. Принципиально новые, систематические, синергетические подходы к явлениям природы и социума позволили определить основные изменения в фундаментальной науке:

- развивается иерархичность и фрактальность сложных реальных структур материалов и природных объектов [1–4];
- наблюдается стохастичность и вероятностность хода эволюции сложных реальных систем взамен детерминизма;
- определена необратимость, неравновесность, нелинейность и непредсказуемость в реальных термодинамических открытых системах;
- вскрыта автоволновость в развитии любых живых и природных объектов, социума и Вселенной;
- установлена общность единых парадигм для макро-, мезо- и микромира;
- развивается междисциплинарность подходов к явлениям природы, основанная на интеграции наук: кибернетике, синергетике, экологии [5–7];
- создана глобалистика – обострение общечеловеческих проблем выживания людей на Земле.

Главная парадигма современного материаловедения – «от микроструктуры материала к его макросвойствам» (рис.1) приобрела новое содержание благодаря синтезу иерархии структур и моделей пластической деформации и разрушения на макро-, мезо- и микроуровнях [8].

Микроуровень реальной структуры материала (рис. 2) учитывает динамику точечных дефектов и отдельных дислокаций. Макроуровень анализируется классической механикой с учетом реальности макроструктуры объекта. Связующим звеном служит мезоуровень структуры, где изучаются дислокационно–дисклинационные ансамбли, блоки, фрагменты, ячейки, полигоны внутри зерен. Для этого уровня характерно сочетание дислокационного скольжения и дисклинационной ротации при развитии пластической деформации.

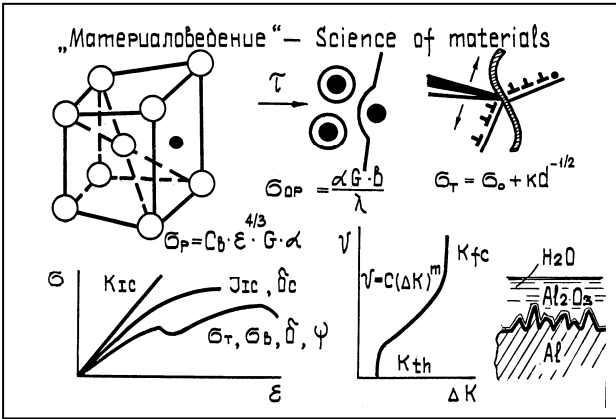


Рис. 1. Основная парадигма современного материаловедения: «От реальной структуры материала к его физико–механическим свойствам».

Верхний ряд – примеры моделей дефектов микро– и мезо–структуры материала: (слева–направо) – упругая деформация кристаллической решетки растворенными примесными атомами; – торможение движущейся дислокации дисперсными избыточными фазами (частицами); – торможение дислокационных нагромождений границами зерен.

Нижний ряд – примеры, отражающие изменение некоторых физико–механических свойств под воздействием структурных дефектов, изображенных в верхнем ряду.

Структурные уровни деформации		
МИКРО	МЕЗО	МАКРО
$\frac{dy}{dt} = b \cdot \dot{\gamma} \cdot \rho$	$\dot{\varepsilon} = D \cdot \dot{\gamma} \cdot W \cdot 2a$	$E = \frac{\sigma}{\varepsilon}, \sigma_{don} = \sigma, \frac{1}{n}$
Теория дислокаций. Микромеханика разрушения	Теория дисклинаций. Мезомеханика деформ. разруш.	Континуальная теория пластич. Механика разрушения
Размеры структурных элементов - блоков, м		
$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-1}$

Рис. 2. Структурные уровни деформации и разрушения материалов.

– скорость пластической деформации скольжением, b – вектор Бюргерса дислокации, –

средняя скорость движения дислокации, ρ – плотность дислокаций, ε – скорость пластической деформации ротацией, D – число дисклинационных диполей, W – вектор ротации (Франка), v – средняя скорость ротации, $2a$ – шири-

на дисклинационного диполя, E — модуль упругости Юнга, σ_T — предел текучести материала, ϵ — макродеформация материала при изгибе, $\sigma_{\text{доп}}$ — допускаемое напряжение, n — коэффициент запаса прочности.

Большое развитие получает физическая мезомеханика материалов [9,10], как аппарат синтеза физических моделей и количественных расчетов (численное моделирование процесса пластической деформации и упрочнения на мезоуровне).

Современная металлофизика вскрыла волновой характер самоорганизации мезоструктур при внешнем энергетическом воздействии на материал — вслед за хаотическим нагромождением свежих дислокаций наступает период самоорганизации ячеистых субструктур, сменяемый при дальнейшей деформации сложными дисклинационными диполями (возникновение полосовых мезоструктур) [11–14]. Реальный факт самоорганизации в структуре материалов позволил расширить это фундаментальное представление на все масштабные уровни окружающей природы и социума (рис. 3).

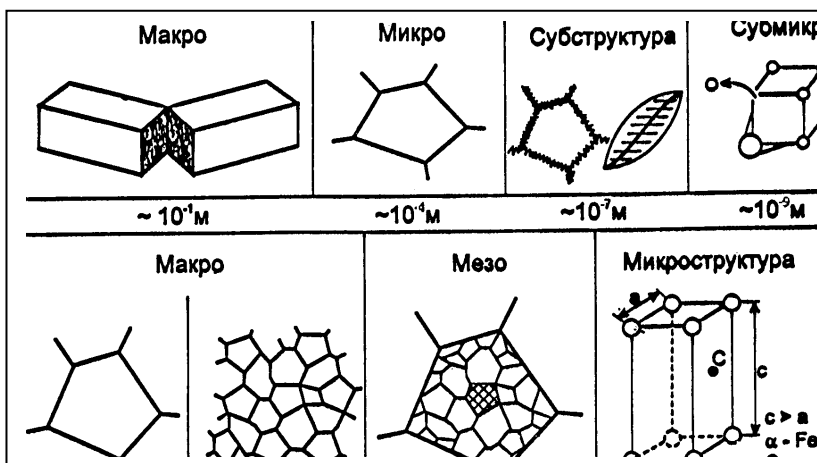


Рис. 3. Новая иерархия структур в современном материаловедении.

Верхний ряд — традиционная классификация структур, нижний ряд — новая классификация (размерный ряд) на основе синтеза физики конденсированного состояния и механики.

Современное материаловедение как междисциплинарная наука о связях реальной структуры материала с его физико-механическими свойствами в XXI веке будет развиваться как в фундаментальном плане, так и в создании новых функциональных и гибридных материалов, сочетающих в себе различные типы металлов, керамик и полимеров. Будет развиваться поиск новых материалов для работы в экстремальных условиях:

- высокого вакуума (для космических полетов и новой техники),

- сверхнизких температур (для криогенной техники),
- сверхвысоких температур (для ракетных двигателей),
- агрессивных сред (для новых химических технологий),
- сверхвысокого давления (для синтеза алмазов),
- радиационного облучения (для атомной энергетики),
- невесомости (для космических кораблей и полетов),
- мощных вибраций (для ракет и транспортных машин),
- интенсивного износа (для скоростных двигателей).

Развитие научных исследований в области современного материаловедения в XXI веке будет, вероятно, ориентировано на решение пяти наиболее важных проблем.

1. Повышение конструктивной прочности массовых материалов.
2. Создание новых композиционных материалов.
3. Конструирование новых материалов на атомно–молекулярном уровне.
4. Модифицирование поверхности высокоэнергетическими воздействиями
5. Изучение и использование новых наноструктурных углеродных кластеров – фуллеренов и нанотруб (рис.4–8).

Проблема первая (рис.4) включает улучшение физико–механических характеристик материалов, имеющих широкое применение. Типичным примером этого направления может служить повышение конструктивной прочности стали для деталей машин и различных конструкций.

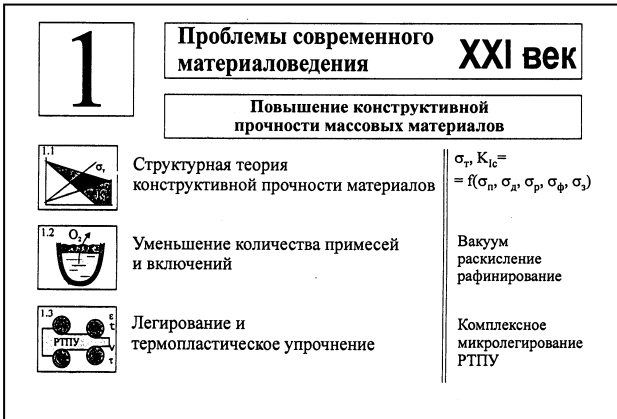


Рис. 4. Проблема 1. – Повышение конструктивной прочности массовых материалов.

Подпроблема 1.1. представлена структурной теорией конструктивной прочности материалов, основанной на интеграции современных достижений

металлофизики, нелинейной механики пластической деформации и разрушения, на теории диссипативных структур, синергетике и нелинейной динамике, на фрактальности и самоорганизации микро– и мезоструктур при неравновесных фазовых переходах [8,15–19]. Структурная теория конструктивной прочности позволяет вскрывать эффективные дислокации

онно–дисклинационные модели упрочнения материала в каждом конкретном случае его использования [12,13,20]. Эти оптимальные модели позволяют получить необходимую реальную структуру материала, путем конструирования новых, высоких технологий упрочнения для повышения эксплуатационных характеристик (для повышения конструктивной прочности материала) изделий из выбранного материала (стали).

Созданная [8,11,20] структурная теория конструктивной прочности подтвердила общность парадигм современного материаловедения для микро–, мезо– и макроструктурных уровней пластической деформации, упрочнения и разрушения материалов. Подпрограммы 1.2. и 1.3. (рис.4) развивают структурную теорию конструктивной прочности в приложении к реальным технологическим процессам улучшения качества материалов.

Идея сочетания наиболее эффективных дислокационно–дисклинационных (двух или даже трех) моделей упрочнения [8,20] была реализована при разработке новой, высокой технологии – регулируемого термопластического упрочнения (способ РТПУ) для повышения конструктивной прочности стали [8,11,20]. Так в РТПУ значительное размельчение зерен аустенита удачно сочетается с другой эффективной моделью создания в мелком зерне организованных дислокационно–дисклинационных построений (ансамблей) ячеисто–полигонального типа. Синергетический эффект от суммарного действия этих двух моделей упрочнения позволяет, по сравнению с традиционными способами термической обработки стали (закалка и отпуск), либо повысить показатели прочности (предел текучести и предел прочности) при равной пластичности и трещиностойкости, либо повысить трещиностойкость при сохранении равного уровня прочности.

Способ РТПУ назван [8,11] регулируемым так как ряд параметров этого процесса (температура аустенитизации, степень деформации в предпоследнем и последнем проходе в прокатных валках, время междеформационного интервала, скорость охлаждения и другие) могут легко регулироваться для получения требуемой структуры и, следовательно, достижения необходимого уровня конструктивной прочности стали.

В ближайшие годы перспективная структурная теория конструктивной прочности и основанная на этой теории технология регулируемого термопластического упрочнения стали (способ РТПУ) вероятно будут востребованы как исследователями в научных лабораториях, так и практиками в металлургической промышленности.

Проблема вторая (рис.5) включает различные аспекты конструирования новых композиционных материалов, сочетающих в себе несущие волокна (стержни) с основой (матрицей)[21].

Подпроблема 2.1. предусматривает расширение использования в композиционных материалах различных керамик. Обладая целым комплексом положительных свойств (высокие твердость и прочность, жаростойкость и –жаропрочность, антикоррозийность и другие) керамики

весьма хрупки и это сдерживает их использование для деталей машин и конструкций.

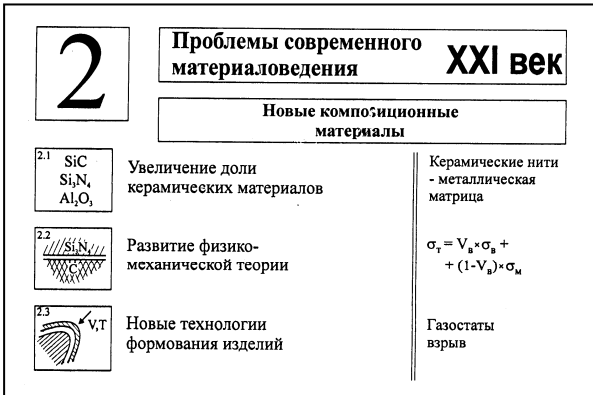


Рис. 5. Проблема 2.
– Разработка новых композиционных материалов.

Решение этой проблемы возможно путем использования керамик при конструировании композиционных материалов как в качестве несущих

элементов так и для материала матриц.

Подпроблемы 2.2. и 2.3. развивают теорию и технологию композиционных материалов главным образом при использовании углеродных материалов и керамик.

Проблема третья (рис.6) охватывает новые возможности в конструировании принципиально новых материалов с модулированными структурами, которые открываются последними достижениями материаловедения в микроэлектронике.

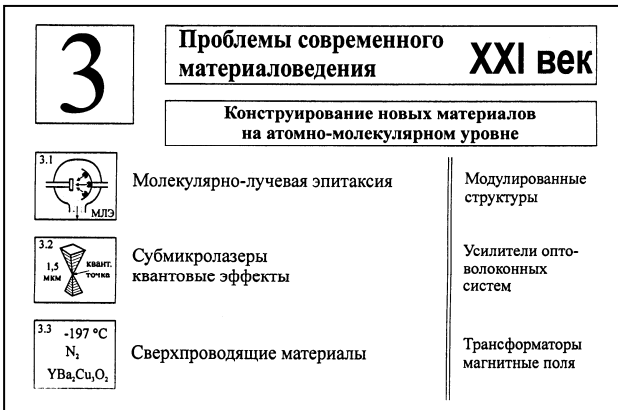


Рис. 6. Проблема 3.
– Конструирование новых материалов на атомно-молекулярном уровне.

Высокая технология молекулярно-лучевой эпитаксии (подпроблема 3.1.) позволит создавать любые

новые материалы путем конденсации атомов на подложке в условиях глубокого вакуума. Пока такие экспериментальные установки («Катунь» в институте физики полупроводников СО РАН) используются для получения интерметаллических соединений определенного состава и структуры в микроэлектронике. Но совершенствование этой технологии в будущем,

позволит распространить идеи целенаправленного конструирования материалов и для других объектов техники, информатики, биотехнологии.

Развитие опто–волоконных систем связи потребует новых источников когерентного излучения (подпрограмма 3.2.). Субмикрولазеры с квантовыми эффектами будут иметь модулированную мезоструктуру, полученную с помощью технологии молекулярно–лучевой эпитаксии.

Особое место (подпроблема 3.3.) в создании неизвестных ранее, сложных материальных композиций занимают сверхпроводящие материалы.

Неожиданный прорыв в эволюции повышения пороговой температуры для ряда известных сплавов типа ниобий–титан в 1986 году, когда эффект сверхпроводимости был открыт для керамики уже при температуре жидкого азота, только активизировал многочисленные исследования в развитых странах мира. В ближайшие десятилетия следует ожидать как новых теорий (взамен теории парных электронов БШК), так и новых сверхпроводящих материалов, обеспечивающих развитие уникальных ускорителей заряженных частиц в ядерной физике, новых измерительных систем и т.д.

Проблема четвертая (рис.7) охватывает значительные изменения в свойствах поверхности изделий, что вместе с особыми характеристиками объема, составляет смысл комбинированного упрочнения деталей машин и конструкций, работающих в условиях высоких контактных напряжений, интенсивного износа и коррозионных воздействий. Интересы исследователей будут направлены [16,18] как на изменение химического состава в поверхностном слое, так и на изменение структуры, которые обеспечат улучшение эксплуатационных характеристик детали в целом.

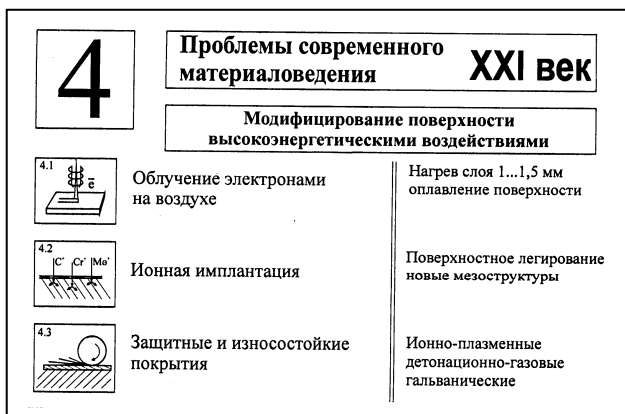


Рис. 7. Проблема 4. – Модифицирование поверхности высокоэнергетическими воздействиями.

Высокоэнергетическое воздействие на поверхность электронами (подпрограмма 4.1.) активизирует-ся благодаря созда-

нию мощных ускорителей с выводом электронного пучка из вакуумной камеры на воздух. Будут развиваться исследования активного нагрева поверхности (для поверхностной термической обработки) и поверхност-

ного оплавления изделий с дополнительным вводом легирующих элементов.

Высокодозная ионная имплантация (подпроблема 4.2.) получит дальнейшее развитие в направлении создания в тонком поверхностном слое изделия неравновесных, высокодефектных мезоструктур, направленных на повышение конструктивной прочности изделия.

Защитные и износостойкие покрытия (подпроблема 4.3.) [17,18] сохраняет свое значение для защиты поверхности изделий от термического воздействия, от различных видов износа, от агрессивных воздействий среды.

Проблема пятая (рис.8) связана с получением и использованием принципиально новой структурной формы (модификации) углерода – с наноструктурными кластерами – фуллеренами и нанотрубами.



Рис. 8. Проблема 5. – Новые наноструктурные кластеры фуллерены и нанотрубы.

Вероятно, усилия исследователей будут направлены на разработку технологии получения кластеров, пригод-

ной для массового и дешевого получения нанокристаллического материала (подпроблема 5.1.), на изучение физико-химических и механических характеристик фуллеренов и нанотруб, зависящих от дефектов микроструктуры и от степени очистки от примесей (подпрограмма 5.2.), на поиск новых областей применения этих новых материалов (подпроблема 5.3.).

Все пять вышеперечисленных проблем современного материаловедения не исключают и другие, возможные, важные направления исследований в начале XXI века как фундаментального, так и прикладного плана.

Все эти научные поиски будут основываться на:

- главной парадигме современного материаловедения – «от реальной структуры материала – к его свойствам» (рис.1);
- принципиальной классификации реальной структуры (рис.3) и общности парадигмы для микро-, мезо- и макроуровней эволюции структуры, развития упругой, пластической деформации и разрушения материала (рис.2).

Современное материаловедение, как наука о структуре и свойствах различных материалов, существенно модернизируется за счет интеграции идей физики конденсированного состояния, химии и технологии неорганических веществ, механики твердого деформируемого тела и нелинейной механики разрушения[23–25].

Единый синергетический подход к явлениям первичной и вторичной кристаллизации, упругой и пластической деформации и разрушению стал возможен благодаря новому пониманию реальной структуры материалов на всех иерархических уровнях.

Синергетика, самоорганизация, нелинейная динамика и теория единой блочности структур позволили нам создать структурную теорию конструктивной прочности и разработать новые, прогрессивные технологии упрочнения материалов.

1. *Mandelbrot B.B.* The Fractal Geometry of Nature. –San Francisco: Freeman, 1982. –132p.
2. *Hornbogen E.* Fractals in microstructure of metals. –Intern. Materials Reviews, 1989. –v.34, №6. p.277–296.
3. *Иванова В.С., Баланкин А.С., Бунин И.Ж., Оксогоев А.А.* Синергетика и фракталы в материаловедении. –М: Наука, 1994. –383с.
4. *Владимиров В.И., Романов А.Е.* Дисклинации в кристаллах. –Ленинград: Наука, 1986. –224с.
5. *Пригожин И.Р., Стенгерс И.* Порядок из хаоса. –М: Прогресс, 1986. –432с.
6. *Капица С.П., Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г.* Синергетика и прогнозы будущего. –М: Наука, 1997. –285с.
7. *Хакен Г.* Синергетика. –М: Мир, 1980. –400с.
8. *Тушинский Л.И.* Теория и технология упрочнения металлических сплавов. –Новосибирск: Наука, 1990. –306с.
9. *Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Макаров П.В. и др.* Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. –Новосибирск: Наука, 1995. Т.1. –297с.; Т.2. –317с.
10. *Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В.* Структурные уровни деформации твердых тел. –Новосибирск: Наука, 1985. –217с.
11. *Тушинский Л.И.* Развитие теории и технологии упрочнения материалов. –Новосибирск: Научный Вестник НГТУ, 1996, №2. –с.155–176.
12. *Тушинский Л.И., Батаев А.А.* Субструктурное упрочнение стали. Известия вузов. Физика, 1991, №3. –10с.
13. *Большаков В.И.* Субструктурное упрочнение конструкционных сталей. –Канада, 1998. –320с.
14. *Конева Н.А., Козлов Э.В.* // Известия вузов. Физика. 1982, –№8. –с.3–14.
15. *Тушинский Л.И., Батаев А.А., Тихомирова Л.Б.* Структура перлита и конструктивная прочность стали. –Новосибирск: Наука, 1993. –28
16. *Тушинский Л.И., Потеряев Ю.П.* Проблемы материаловедения в трибологии. –Новосибирск: Наука, 1991. –64с.
17. *Тушинский Л.И., Плохов А.В.* Исследование структуры и физико-механических свойств покрытий. –Новосибирск: Наука, 1986. –198с.

18. *Tushinsky L.I., Kovensky I.M., Plokhov A.V.* Coated Metal. Structure and Properties of Metal – Coating Compositions. –Berlin, Yeidelberg: Springer, 2002. – 440p.
19. *Тушинский Л.И., Плохов А.В.* Новые материалы и технологии. Теория и практика упрочнения материалов в экстремальных процессах. –Новосибирск: Наука, 1992. –301с.
20. *Тушинский Л.И.* Оптимальные структуры сплавов с высокими прочностью и трещиностойкостью. ФХММ, 1987, №2. –с.30–37.
21. *Батаев А.А., Батаев В.А.* Композиционные материалы: строение, получение, применение. Учебник. –Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2002. –384с.
22. *Пикеринг Ф.Б.* Физическое металловедение и разработка сталей. Пер. с англ. – М: Металлургия, 1982. –183с.
23. *Ботвина Л.Р.* Кинетика разрушения конструкционных материалов. –М: Наука, 1989.
24. *Романив О.Н.* Вязкость разрушения конструкционных сталей. –М: Металлургия, 1979.
25. *Мешков Ю.Я.* Физические основы разрушения стальных конструкций. –Киев: Наукова Думка, 1981.