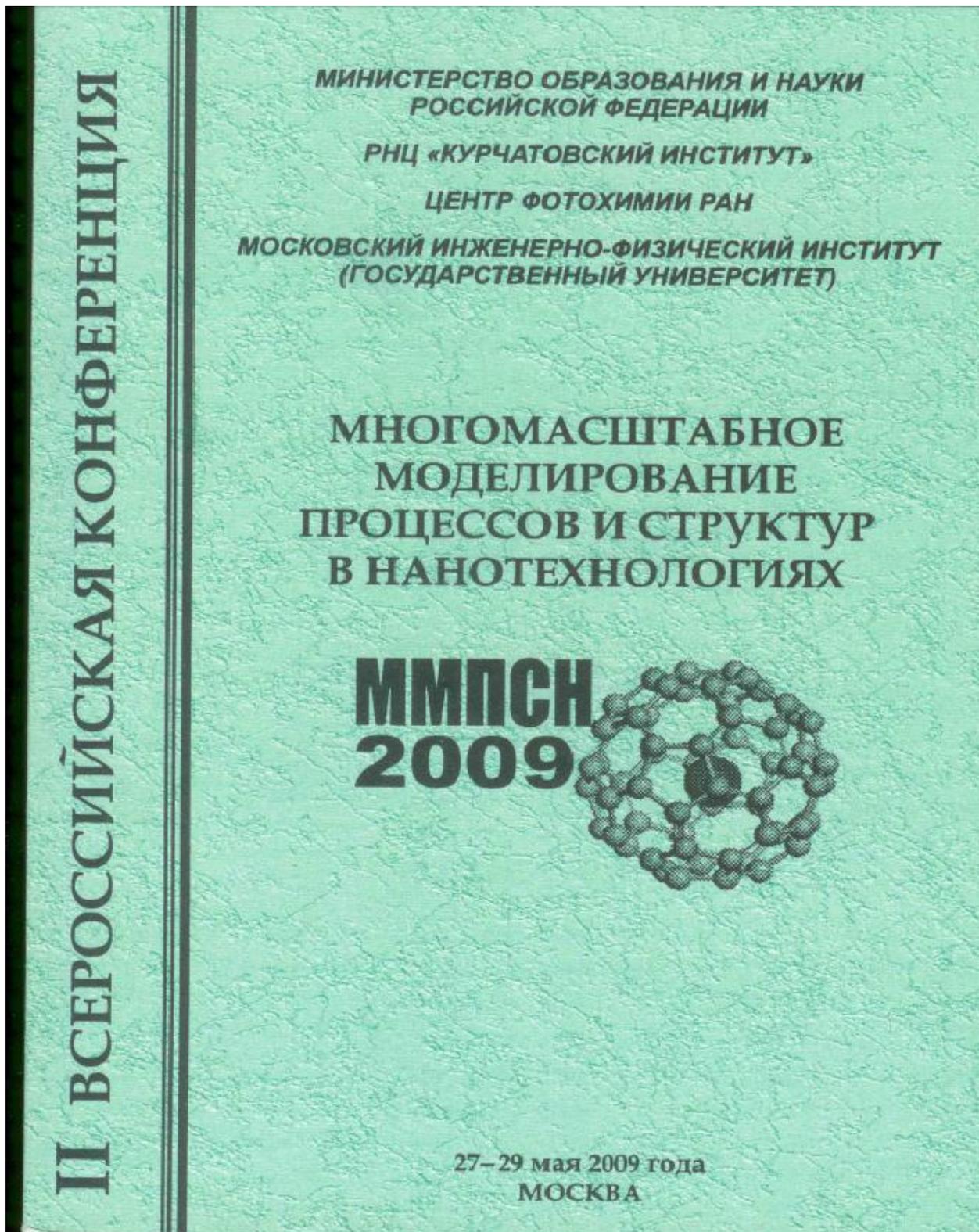


http://mmpsn.mephi.ru/files/file/Abstracts_MMPSN-2009.pdf

Доклад на II всероссийской конференции «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях», стр.248

«Прогноз механических и динамических свойств материалов с микро- и наноструктурой по градиентной теории сред»



тельной. Для анизотропных сред это оказывается не так, и отсутствуют теоретические ограничения на значения коэффициента Пуассона.

Для большинства слоистых анизотропных наностержней, коэффициент Пуассона найден положительным. Выявлен ряд материалов (например, As, MoS₂) для которых в некоторых направлениях коэффициент Пуассона становится отрицательным.

Отметим также, что для графита коэффициент Пуассона является всегда положительным в случае гексагональной модификации, но может стать отрицательным для некоторых поперечных направлений в случае ромбоэдрической модификации.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 11 и гранта Президента РФ на поддержку ведущих научных школ НШ-134.2008.1.

С. А. ЛУРЬЕ

*Учреждение Российской академии наук Институт прикладной механики РАН,
Москва*

ПРОГНОЗ МЕХАНИЧЕСКИХ И ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ С МИКРО- И НАНОСТРУКТУРОЙ ПО ГРАДИЕНТНОЙ ТЕОРИИ СРЕД

Исследуются механические свойства материалов с микро- и наноструктурой и в частности композитов с микро- и нано-включениями, свойства которых с локальным характером взаимодействий в зоне контакта различных фаз. Развивается методика прогноза свойств нанокompозитов различной структуры с учетом возможности изменения параметров технологических процессов.

Для адекватного моделирования и прогноза материалов с наноструктурой развита континуальная прикладная теория межфазного слоя, [1-4]. Масштабные эффекты в таких материалах могут являться весьма значительными для эффективных свойств. Они определяются спектром адгезионных взаимодействий на границах контактирующих компонент и когезионными взаимодействиями в окрестности границ контакта.

Установлены приближенные аналитические оценки свойств межфазного слоя в окрестности границы контакта от модулей упругости и когезионных характеристик фаз [4-6]. Эти исследования проведены совместными усилиями двух групп исследователей из ИПРИМ РАН (С.Лурье, П. Белов, Д. Волков-Богородский, Ю. Соляев) и ВЦ РАН (В. Зубов, Н. Тучкова). Показано, что межфазный слой появляется в каждой из фаз, занимая часть их объема около границ контакта. Взаимодействия в межфазном слое имеют локальный характер и концентрируются около границ

фаз. Тем не менее, влияние их на эффективные макро характеристики материала может быть весьма существенным для сред, с большой протяженностью границ контакта фаз.

Континуальная теория адгезии, предложенная в рамках теории межфазного слоя, непротиворечива, вполне согласуется с известными экспериментальными фактами и без каких либо предположений позволяет моделировать такие эффекты как поверхностное натяжение, капиллярность, мениск, а также такие эффекты как волнообразование на поверхности тел. Установлено, что адгезионные составляющие решения контактной проблемы всегда сводятся к некоторой поврежденности границ контакта. Параметры, отвечающие за адгезионные взаимодействия являются одними из основных характеристик при моделировании технологических параметров процессов производства наноматериалов, ибо именно они моделируют поверхностную модификацию свойств компонент в процессе производства нанокомпозитов с заданным спектром свойств.

Показано, что градиентная теория межфазного слоя может быть продолжена вплоть до уровня межатомных расстояний и является весьма перспективной для установления моста между атомистическим и континуальным описанием нано-материалов. Поэтому она может оказаться ключевой при адекватном описании наноструктурных взаимодействий, с использованием эффективных методов континуального моделирования механики деформируемых сред.

Список литературы

1. Лурье С.А., Белов П.А //Математическое моделирование систем и процессов, 14, Пермь, с. 114-132 (2006).
2. Lurie S., Belov P., Volkov-Bogorodsky D., Tuchkova N., //Comp. Int. J. Comp Mater Sci, 28(3-4), 529-539 (2003).
3. Lurie S., Belov P., Volkov-Bogorodsky D., Tuchkova N. // J. of Mat. Scs, v.41, № 20, pp. 6693-6707 (2006).
4. Lurie S., Belov P. Cohesion field: Barenblatt's hypothesis as formal corollary of theory of continuous media with conserved dislocations// Int.J.of Fracture, 50,(1-2), pp. 181-194 (2008).
5. Lurie S., Belov P. & Tuchkova N. // Int. J. Comp. Mater. Scs. A., 36(2):145-152 (2005)
6. Lurie S., Hui D., Zubov V., Tomlinson G., and Williams. //Int. J. of Comp. Scs. and Eng. V2.(3/4), 228-241(2006).