

Снять напряжение!

Физики ставят заслон разрушениям в материалах

Что мы знаем о реакциях в упругих и неупругих телах? Не стоит делать удивленное лицо: тема не так далека от действительности, как можно подумать. Достаточно сказать, что достижения наших ученых в этой области помогут развить инновационную экономику страны и освободить ее от нефтяной зависимости. Сегодня у нас есть возможность восполнить досадный пробел в знаниях с помощью нашего корреспондента, записавшего рассказ старшего научного сотрудника Института проблем машиноведения (ИПМаш) РАН кандидата физико-математических наук Игоря КОРОЛЕВА. Используя аналитико-численные подходы и решения, молодой ученый изучает влияние механических напряжений на распространение химических реакций в упругих и неупругих телах. Исследование поддержано грантом Президента РФ.



- Прогресс современного общества немалым без развития новых технологий, а технологии немалым без развития промышленности

такого процесса очень важна для самых разных отраслей промышленности. Например, для оценки времени жизни деталей микроэлектронных механических систем (МЭМС), выполненных из поликристаллического кремния. Экспериментально установлено, что время жизни этих элементов определяется ростом трещин в оксидном слое. Образование такого слоя - результат протекания химических реакций, скорость которых зависит от напряжений. Другой пример - создание надежных и энер-

В ней происходит химическая реакция, целиком локализованная на фронте реакции. Фронт представляет собой границу раздела исходного и реагирующего материала. Реакция поддерживается диффузией газообразной компоненты к фронту реакции. Мы предполагаем, что для диффундирующей газовой компоненты оксид представляет собой жесткий скелет. В то же время химическое превращение сопровождается изменением объема и при сохранении сплошности тела может измен-

поненты тензора напряжений. Таким образом, у нас скорость фронта реакции зависит как от чисто химических факторов, так и от механических напряжений в деформируемом теле. При этом сами напряжения, в свою очередь, зависят от положения фронта химической реакции.

Важным для нас стало то, что полученное кинетическое уравнение - аналитическое, а не эмпирическое, его можно использовать для описания самых разных процессов. Кроме того, аналитическая зависимость позволила нам исследовать влияние различных физико-механических параметров на скорость движения фронта на примере простой модельной задачи - развития плоского слоя химических реакций в пластине под действием внешних напряжений. Мы установили, что приложение растягивающего внешнего поля увеличивает скорость движения фронта реакции, а приложение сжатия, наоборот, замедляет. Также мы показали, что при определенном соотношении параметров внешнего сжимающего поля может заблокировать дальнейшее движение фронта реакции. Дополнительно проанализировали, при каком соотношении

ся за более сложные задачи. Мы исследовали развитие фронта химических реакций (окисление кремния в пластине с выточкой) под действием внешнего поля. Эта задача моделирует движение фронта химических реакций с поверхности шестеренки в МЭМС. Для различных значений внешнего поля мы получили различные сценарии движения фронта. Привожу примеры, иллюстрирующие это. На рисунке А - растяжение в горизонтальном направлении, на рисунке Б - сжатие в горизонтальном направлении. Темным цветом показан материал после химической реакции (превращенный материал), светлым цветом - исходный материал (до превращения).

Дальнейшим шагом в наших исследованиях будет изучение неупругих тел. Необходимость этого связана с очень большими напряжениями, которые возникают в материале при химическом превращении. В реальной жизни эти напряжения довольно быстро релаксируют. Мы хотим смоделировать этот процесс, рассматривая вязкоупругий материал.

Среди других наших работ, которые стоит отметить, создание теоретической модели, позволяющей решить связанную задачу механохимии - связать скорость движения фронта химических реакций и напряженно-деформированного состояния системы. Развивая дальше теоретический подход, мы получим возможность применять нашу модель к

нович. - Постоянно повышающаяся сложность новых технических систем ставит перед нами, учеными, новые вызовы. Мы должны более четко понимать используемые в промышленности физические процессы и давать более точные предсказания относительно поведения материалов в тех или иных условиях. Поэтому важное направление развития науки - создание аналитических моделей поведения реальных конструкций с учетом различных физических процессов. Это естественным образом приводит нас к постановке и решению связанных задач. Термин "связанные задачи" в научной среде подразумевает такую постановку задачи, в которой имеется взаимосвязь между различными физическими процессами, к примеру термостойкость, термомеханика.

Моя сфера исследования связана с решением проблемы из области механохимии, а именно с построением и верификацией аналитической модели учета влияния механических напряжений на распространение химических реакций в упругих и неупругих телах. Эксперименты неоднократно доказали, что механические напряжения приводят к изменению скорости движения фронта реакций: реакция может как ускоряться, так и замедляться под влиянием внешнего воздействия. Однако, несмотря на большое количество экспериментальных данных, ключевые моменты описания этого процесса остаются скорее на эмпирическом, чем на теоретическом уровне. Но, следует отметить, "тонкая" настройка описания

осложняет задачу конструирования изделий. Учет влияния напряжений на протекание химических реакций и влияния химических

напряжений на фронте реакции дополняют дополнительные напряжения. На основании второго закона термодинамики в форме

неравенства Клаузиуса - Дюгана, баланса массы и импульса для открытой системы "деформируемое тело - диффундирующий газ" мы записали выражение диссипации энергии за счет изотермического квазистатического распространения фронта реакции. Проведя аналогию с классической термодинамикой, ввели понятие тензора химического средства, которое выражается через тензоры энергии-импульса Эшелби. Дальше естественным образом следует записать кинетическое уравнение движения фронта химической реакции в зависимости от нормальной компоненты тензора химического средства. Само выражение для тензора химического средства включает в себя ком-

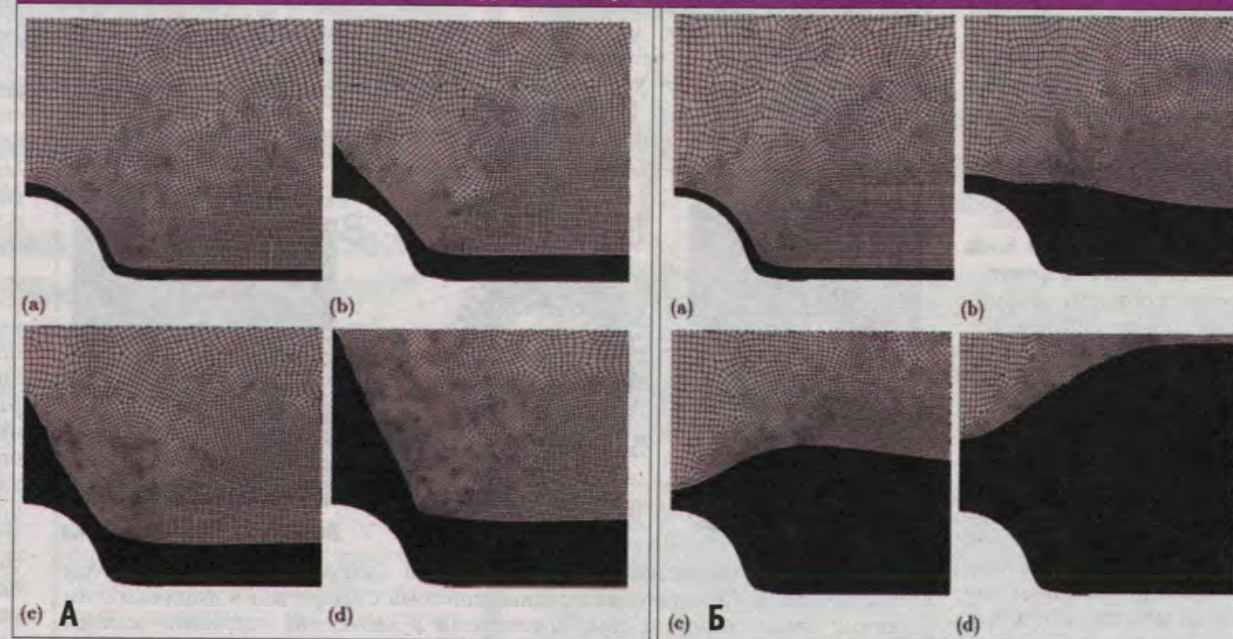
позитивный вклад в скорость движения фронта реакции и деформации. А учитывая механизмы неупругого деформирования, мы еще больше приближимся к детальному описанию реального процесса развития фронта химических реакций в теле, которое подвергается механическим воздействиям.

Следующим шагом будет калибровка параметров модели для описания реального процесса (например, окисления кремния). Удачное завершение такой калибровки позволит более точно предсказывать время жизни различных де-

талей микрорелевантных систем. А это знание поможет производителю таких устройств оптимизировать конструкцию, увеличить ее надежность. Аналогичный подход планируем реализовать для анализа формирования металлгидридов и моделирования процессов в литий-ионных батареях высокой емкости. Такой сплав теоретического исследования и реального производства станет предпосылкой для развития процессов инновационной экономики России и освобождения ее от нефтяной зависимости, что особенно важно в наше непростое время.

Фирюза ЯНЧИЛИНА
Иллюстрации предоставлены
И.Королевым

Сценарии движения фронта для различных значений внешнего поля



реакций на возникновение внутренних напряжений и даже на процессы разрушения крайне важен при формировании металлгидридов в водород-аккумулирующих материалах для водородного двигателя, а также при процессах в литий-ионных батареях.

Цель моего исследования - установить аналитическую зависимость между напряженно-деформируемым состоянием системы и скоростью движения точек фронта химических реакций. Работа в этой области ведется в ИПМаш нашей командой под руководством профессора Александра Борисовича Фрейдина.

Мы рассматриваем открытую систему "деформируемое тело - диффундирующий газ".

неравенства Клаузиуса - Дюгана, баланса массы и импульса для открытой системы "деформируемое тело - диффундирующий газ" мы записали выражение диссипации энергии за счет изотермического квазистатического распространения фронта реакции. Проведя аналогию с классической термодинамикой, ввели понятие тензора химического средства, которое выражается через тензоры энергии-импульса Эшелби. Дальше естественным образом следует записать кинетическое уравнение движения фронта химической реакции в зависимости от нормальной компоненты тензора химического средства. Само выражение для тензора химического средства включает в себя ком-

их необходимо учитывать, а при каком соотношении ими можно пренебречь.

Но при переходе к задачам с более сложной геометрией мы обнаружили, что аналитическое решение сопряжено с серьезными трудностями. Поэтому пришли к мысли реализовать разработанную нами модели в средствах численного моделирования. Разумеется, в численных пакетах нет этой модели, поэтому с помощью программирования мы разработали процедуру, которая позволяет решать задачу о движении фронта реакции, основываясь на численном расчете напряженно-деформированного состояния и нашего кинетического уравнения. Это позволило нам взять-