

НАУЧНАЯ СРЕДА

Как совместить в металле высочайшую прочность и гибкость? В чем секрет знаменитых сталей – дамасской и булатной, которые обладали этими свойствами?

Помочь в разгадке тайн арабских и златоустовских мастеров может технология компьютерного моделирования, позволяющая заглянуть в атомную структуру вещества и выработать ее виртуальную модель. По ней будут создавать и совершенно новые материалы, сплавы с заранее заданными свойствами. Что разглядели ученые в атомной решетке? Об этом наш разговор с профессором ЮУрГУ, доктором физико-математических наук Александром Мирзоевым.



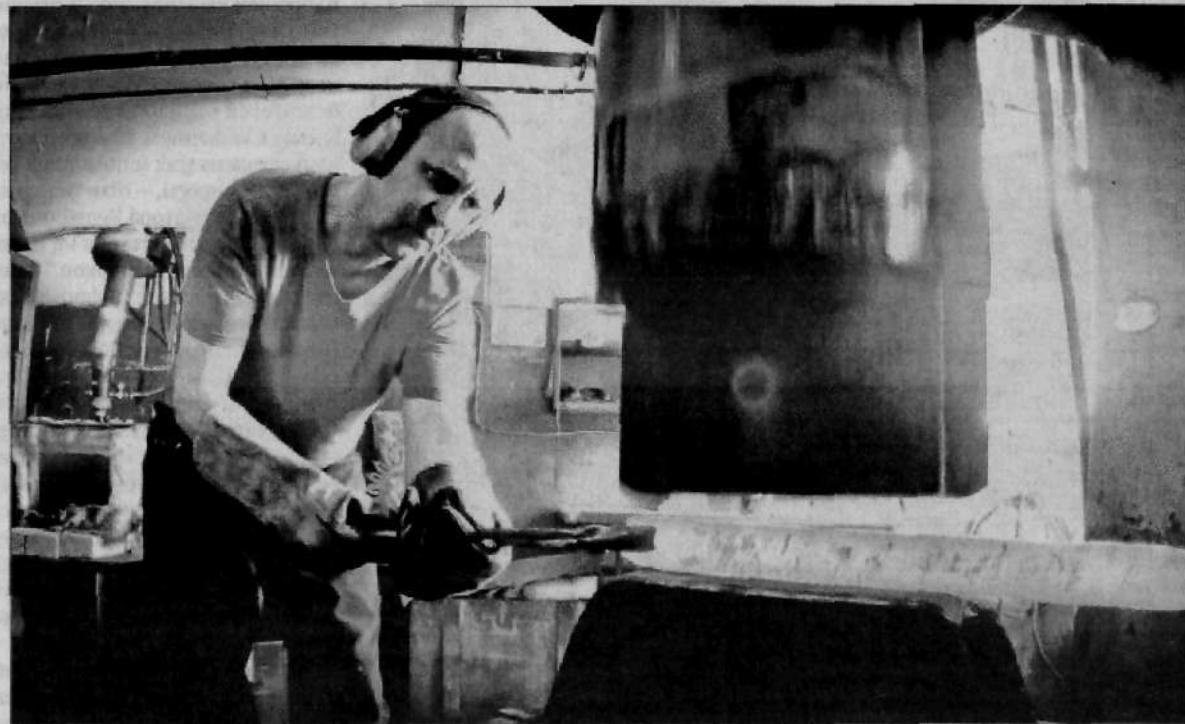
Индийский эффект

— В этом году вы получили на свои исследования крупный грант российского научного фонда...

— Это так. Он рассчитан на три года — по 4,5 миллиона рублей на каждый. Компьютерное моделирование проводится на суперкомпьютерах — «Скиф» и «Торнадо-ЮУрГУ». При изучении свойств многоэлектронных

Виртуальный булат

Челябинские ученые разгадывают секрет стали



Как известно, дамасская сталь изготавливалась из проволоки методом многократной проковки, а булатная — спеканием слоев металла

Нанобронежилет будет!

— Но это касается не только металлов? Как, к примеру, быть с новинками нанотехнологий — композитными материалами?

— Компьютерное моделирование ведется по той же схеме. Так, при добавлении нанотрубок в композитный материал его прочность резко повышается. К нам обратились ученые, создающие для армии бронезилеты, — как поведет себя такой материал? Составить компьютерную модель вполне возможно и для него.

На основе нанотрубок также можно изготовить особо чувствительные сенсоры. А если в эту «трубку» поместить водород, то получим сверхмощное топливо или наноаккумулятор с огромной емкостью. Но захватить водород в нанотрубку очень сложно, и здесь поможет компьютерное моделирование.

— А какие открытия вы уже выдали на-гора, какую они могут принести пользу?

— Мы изучали поведение живых

чений свойств многоэлектронных систем применяем метод Кона-Шэма — уравнение американских ученых, описывающее квантовое поведение электронов в металлах.

Причем мы занимаемся *ab initio*, то есть первопринципным (на атомном уровне) моделированием. У нас нет «подгоночных схем», и нужные параметры материала вычисляем сами. Для этого требуются самые мощные суперкомпьютеры. Высокая точность этого механизма позволяет прогнозировать характерные особенности будущего металла, создавать новые материалы с прогнозируемыми свойствами.

— И все-таки помогает ли компьютерное моделирование разгадать секрет аносовского булата и дамасской стали?

— Практически он уже раскрыт. С точки зрения компьютерного моделирования здесь нет ничего загадочного: это та же высокоуглеродистая легированная сталь. Изюминка ее в способе изготовления. Как известно, дамасская сталь изготавливалась из проволоки методом многократной проковки, а булатная — спеканием слоев металла. Но этот процесс очень сложен, и в промышленных масштабах его воспроизводить экономически не выгодно.

— А как зарождается такая сталь? И есть ли у нее современные аналоги?

— Превращение железа в сталь — это процесс его насыщения углеродом, приводящий к так называемому мартенситному (по фамилии создателя плавильных печей ученого Мартена) переходу. Но важно, чтобы зерна, из которых состоит металл, были мелкими — тогда будет и пластичность, и прочность. Правда, совместить эти разнородные качества удается не всегда.

Но в последние годы в науке был совершен прорыв — индийский исследователь Бхадешия получил такую сталь. Он добавил в металл кремний и марганец, и ему удалось избавиться от карбидов, придающих ей хрупкость, причем гибкость осталась. Мы тоже проводим подобные эксперименты, при этом изменяется и структура кристаллической решетки: из кубической она становится тетрагональной — одна сторона как бы вытягивается. Это и придает металлу повышенную прочность.

Секрет индийского ученого — в составе сплава. Дело в том, что если сталь не содержит кремния, то в ее составе мало углерода, определяющего прочность. А если кремния в избытке, возникает так называемый бескарбидный бейнит (по фамилии американского металлурга Бейна), в котором содержание углерода значительно выше, а зерно остается мелким. Но как избавиться от охрупчивающего сталь карбида? Моделируя эти процессы, мы уже приблизились к разгадке эффекта Бхадешия.

Ловушка для водорода

— Как избавиться от «хрупкой болезни» стали?

— Сталь хрупкой делает водород, при плавке проникающий между узлами кристаллической решетки. Влияние водорода на механические свойства металлов было открыто еще в 1875 году, но до сих пор нет четкого понимания его механизма. Мы выяснили, что, если в металле есть дефекты, водород взаимодействует с ними и это влияет на кинетические и термодинамические свойства. Водород при отверждении расплавленного металла выделяется внутри деталей большого объема, образуя пузырьки-

флокены, что приводит к трещинам. Под воздействием локальных напряжений происходит разрыв атомарных связей и металл разрушается. Уйти от этого можно, используя вакуумную плавку, но это слишком затратный процесс. А методы компьютерного моделирования позволяют предложить другой путь устранения флокенов, создания особо прочных сплавов завтрашнего дня.

— Можно ли из металла убрать водород без колоссальных затрат?

«С точки зрения компьютерного моделирования в булате и дамасской стали нет ничего загадочного — это та же высокоуглеродистая легированная сталь. Изюминка ее в способе изготовления.»

— Как оказалось, в металле могут быть «ловушки» для водорода, которые удерживают его, не дают образовывать пузырьки газа. Долгое время была известна только одна такая «ловушка» — редкоземельный металл палладий, которую обнаружил в 60-х годах XX века уральский ученый-металлург Владимир Архаров. Недавно выяснилось, что ту же роль могут играть и другие подобные элементы — скандий, рубидий. Но они тоже дороги, и мы подыскиваем их более доступные аналоги. Для этого выясняем, какие условия помогают захватить атом водорода. И интересные находки уже есть...

Ведем поиск главных помощников «пленения» водорода — бинарных наночастиц. Возникает размер-

ное несоответствие с кристаллической решеткой металла, и «сфера присутствия» водорода как бы растягивается. При этом изменяется электронная плотность — и он встраивается в структуру железа, не выходя из пузырьков.

Квант Шредингера

— В чем изюминка компьютерного моделирования на микроуровне?

— Для него не подходят уравнения классической физики, и приходится применять законы квантовой механики, действующие в микромире. Например, для понимания волновой функции электронов — уравнение одного из создателей квантовой теории немецкого ученого Шредингера. Мы выясняем, как взаимодействуют атомы, меняются их энергетические характеристики и химические связи. И как ведут себя электроны внутри металла, меняется энергия системы.

Правда, пока даже суперкомпьютер способен смоделировать лишь крошечный кусочек металла — 50 на 50 атомов. Мы рассчитываем электронную структуру кристаллической решетки при помощи европейских программных пакетов Wien 2k и SIESTA, позволяющих просчитать энергохарактеристики материала.

С помощью компьютерного моделирования также определяем спектр фононов — колебаний атомной решетки, тепловые, звуковые, магнитные свойства. Можно рассчитать, как, например, поведет себя будущий металл в глубинах Земли, при чудовищном давлении и температуре.

— Мы изучали поведение жидких металлических расплавов, применяемых на АЭС в качестве теплоносителей. Определяли их плотность, электропроводность, вязкость... Все это необходимо точно знать в атомной энергетике. Немалых успехов добились в моделировании свойств расплавов цезия и рубидия.

Кроме того, мы одни из первых в мире обнаружили изменение знака энергии смещения в сплавах железа и хрома — базовой системы для создания нержавеющей стали. Считалось, что все сплавы Fe-Cr имеют положительную энергию смещения, то есть при высоких температурах они становятся неустойчивыми и распадаются. А мы методом компьютерного моделирования выяснили, что, если в сплаве хрома менее 10 %, он обретет устойчивость к распаду. Это очень важно для металлургии, особенно для создания сплавов, почти не подверженных коррозии. Сфера их применения практически безгранична — от сельского хозяйства до космоса.

Беседовал
Евгений Аникиенко,
фото Вячеслава Шипкоедова



Читайте
и обсуждайте
прочитанное на сайте
www.up74.ru