

Современные проблемы наук о материалах и процессах

Лекция 2

Проблемы разработки материалов с заданными свойствами и технологии их получения, информационные технологии в материаловедении

КЛИМЕНОВ
Василий Александрович
профессор ИШНПТ ТПУ

Содержание лекции

- Принципы разработки материалов с наперёд заданными свойствами
- Требования к материалам и их свойства
- Роль условий окружающей среды и техногенных факторов.
- Получение материалов.
- Методология проектирования материалов и изделий.
- Выбор материалов с помощью диаграмм Эшби.
- Особенности проектирования упрочнённых и изделий с покрытиями.
- Информационные технологии (расчёты фазовых диаграмм, моделирование и машинное обучение).

Принципы разработки материалов с наперёд заданными свойствами



Требования к материалам

- Сохранение формы и целостности конструкции (прочность и устойчивость к внешним силовым воздействиям)
- Обеспечение несущей способности (способность конструкции выдерживать нагрузку, обеспечивая нормальное функционирование изделия – узлы трения)
- Устойчивость к внешним воздействиям окружающей среды (температура, влажность, химически агрессивная среда, биологическая среда)
- Осуществление различных функций при обработке материалов или породы, биологических и медицинских качеств и т.п.
- Обрабатываемость и свариваемость.
- Оптимальное соотношение веса и прочности (особенно для задач освоения космоса, авиации и автомобилестроения)
- Эстетичный вид
- Экологичность
- Приемлемая стоимость

Основные свойства материалов



Свойства материалов, определяющие их конструирование

Материал	Хорошие свойства	Удовлетворительные свойства
МЕТАЛЛЫ	Твердые ($E \approx 100 \text{ ГН м}^{-2}$)	Пр. текучести (чистый, $\sigma_T \approx 1 \text{ МН м}^{-2}$) сплав
Высокие E , K_{Ic}	Пластичные ($\epsilon_f \approx 20\%$)	Твердость ($H \approx 3\sigma_T$) сплав
Низкий σ_T	Вязкие ($K_{Ic} > 50 \text{ МН м}^{-3/2}$)	Усталость ($\sigma_e = 1/2\sigma_T$)
	Высокая темп. плавления ($T_m \approx 1000 \text{ C}$)	Коррозионная стойкость покрытия
КЕРАМИКА	Жесткие ($E \approx 200 \text{ ГН м}^{-2}$)	Очень низкая вязкость ($K_{Ic} \approx 2 \text{ МН м}^{3/2}$)
Высокие E , σ_T	Очень высокие твердость и модуль	Пластичность порошковые методы
Низкий K_{Ic}	Пр. текучести ($\sigma_T > 3 \text{ ГН м}^{-2}$) Высокая темп. плавления ($T_m \approx 2000 \text{ C}$) Коррозионностойкие, средней плотности	
ПОЛИМЕРЫ	Пластичные	Низкая жесткость ($E \approx 2 \text{ ГН м}^{-2}$)
Нормальные σ_T , K_{Ic}	Коррозионностойкие	Пр. текучести ($\sigma_T = 2-100 \text{ МН м}^{-2}$)
Низкий E	Низкой плотности	Низкая температура ($T_G=100\text{C}$) ползучесть Вязкость, часто низкая ($K_{Ic} \approx 1 \text{ МН м}^{-3/2}$)
КОМПОЗИТЫ	Жесткие ($E > 50 \text{ ГН м}^{-2}$)	Пластичность
Высокие E , σ_T , K_{Ic}	Прочные ($\sigma_T \approx 200 \text{ МН м}^{-2}$)	Дорогие
Дорогие	Вязкие ($K_{Ic} > 20 \text{ МН м}^{-3/2}$) Усталостная прочность, коррозионностойкие, низкая плотность	Ползучесть (полимер-матричные композиты)

Промышленные экстремальные факторы

Металлургия
(фурмы,
кристаллизаторы,
чехлы термопар и
тп.)

Температура жидких
металлов и сплавов.
Взаимодействие с O₂
и N₂

Транспорт
(трубопроводный)

Коррозия, стресс-
коррозия,
наводораживание

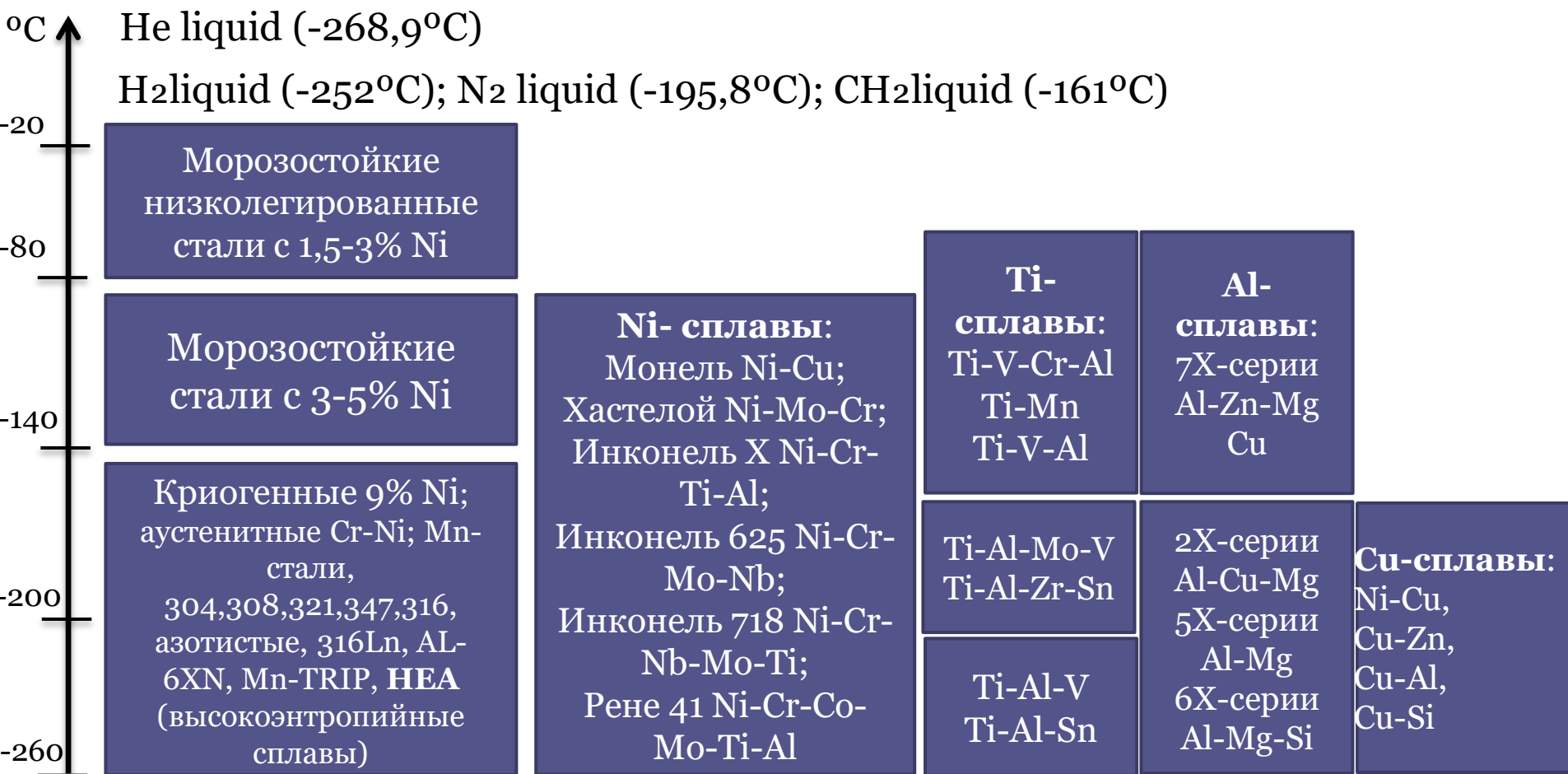
Авиационное
двигателестроение
(лопасти)

$T > 1470 \text{ K}$

Ядерная
энергетика
(система первого
контура)

Радиация
(нейтроны)
Высокие
температуры

Стали и сплавы для низких и криогенных температур

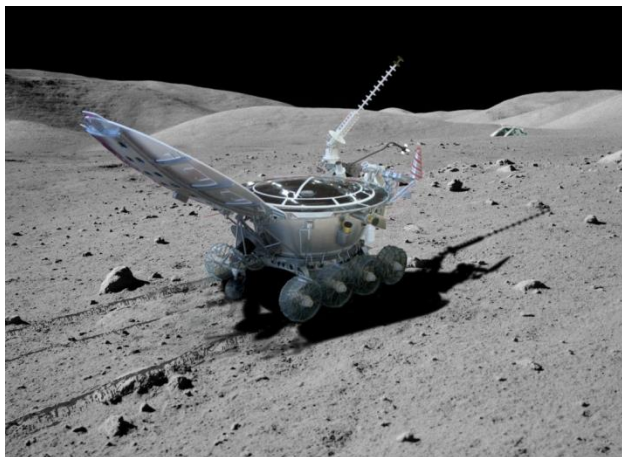


РОЛЬ МАТЕРИАЛОВ В РОБОТОТЕХНИКЕ И МЕХАТРОНИКЕ

Температура от -170 оС до 160 оС

Почти полное отсутствие
атмосферы

Радиация – солнечный ветер,
потoki протонов и электронов,
рентгеновское солнечное
излучение



Роботы на Луне

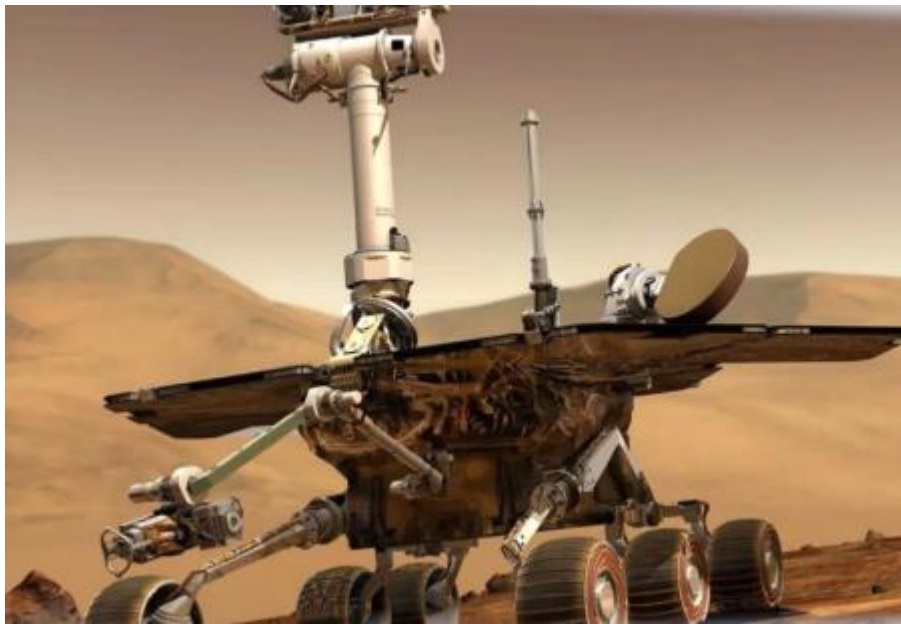
Юйту-2, Китай. Первый робот,
работающий на обратной стороне Луны
(декабрь 2018)



Луноход 1, СССР. Первый колёсный робот,
работавший за пределами Земли
(17.10.1970 - 14.09.1971)

Роботы на Марсе

Средняя температура $-50\text{ }^{\circ}\text{C}$
Атмосфера разреженная, 96% CO_2
Радиация выше, чем на Земле.

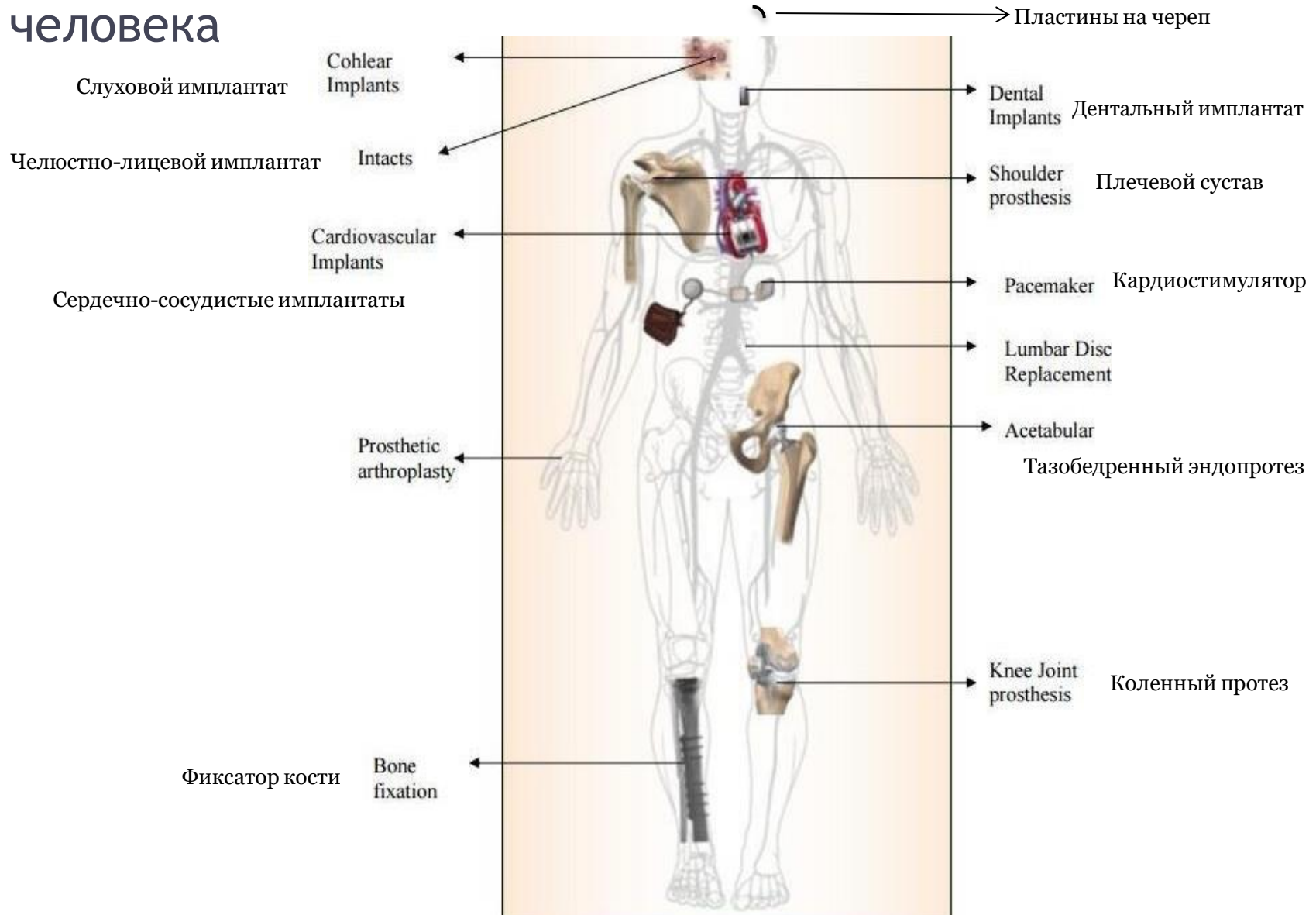


Оппортьюнити (25.01.2004 -
12.06.2018) НАСА, США

Кьюриосити (6.08.2012) НАСА,
США



Применение металлических, керамических и полимерных биоматериалов в качестве имплантатов и эндопротезов в теле человека



Получение материалов и изделий



Условия образования сплавов и соединений

На основе анализа большого числа систем различных элементов можно сделать выводы об условиях образования систем того или иного типа.

1. Оптимальными условиями образования непрерывных твердых растворов между двумя элементами являются: нахождение элементов в одной группе периодической системы, одинаковый тип решетки, лишь незначительное различие размеров атомных радиусов (не более 10%), близость величин ионизационных потенциалов и электроотрицательностей.

2. Если радиусы атомов различаются на 10-20%, что, естественно, приводит к большому различию в ионизационных потенциалах и электроотрицательностях, то происходит образование ограниченных твердых растворов или интерметаллидов.

3. При различии радиусов атомов более чем на 20% элементы, как правило, не взаимодействуют друг с другом и нередко не смешиваются в расплавленном состоянии.

Пользуясь сведениями о свойствах элементов, можно предугадать возможность того или иного взаимодействия между металлами.

Эмпирическое правило Таммана

Элементы одной и той же группы металлов не образуют между собой химических соединений; если какой-нибудь элемент дает химическое соединение с одним из элементов какой-либо группы, то он вступает в соединения со всеми остальными элементами данной группы.

Это явление открыто Тамманом и известно, как правило, $n/8$. Это означает, например, в случае рассмотрения коррозии, что повышение коррозионной стойкости наступает при атомной доли $n/8$, где n – целое число.

На основе выявленных общих закономерностей стал возможен научный подход к проблеме получения сплавов с заданными свойствами, а следовательно, стало возможным, например при разработке коррозионно-стойких сталей и сплавов. Основным инструментом в этом случае – использование периодической системы Д. И. Менделеева.

Методология проектирования

- Книги по дизайну часто кажутся расплывчатыми и качественными; подразумевается, что способность к дизайну похожа на способность писать музыку: дар, данный немногим. И правда, в хорошем дизайне есть элемент творческого мышления (в отличие от логических рассуждений или анализа). Но методология проектирования может быть сформулирована, и при ее соблюдении приведет к практическому решению проблемы проектирования.
- > Вначале есть два параллельных процесса: выбор материалов и дизайн компонентов. Предварительный материал выбирается, и данные для него собираются из таблиц данных или из справочных данных. В то же время составляется предварительный проект компонента, способный выполнять функцию (которая должна быть тщательно определена вначале) и выполняется приблизительный анализ для оценки напряжений, моментов и концентраций напряжений, которым он будет подвергаться. Два процесса объединяются в оценке характеристик материала в предварительном проекте. Если материал может выдерживать нагрузки, моменты, напряжения, не отклоняясь слишком сильно и не разрушаясь, тогда проектирование может продолжаться. Если материал не может работать надлежащим образом, выполняется первая итерация: либо выбирается новый материал, либо изменяется дизайн компонента (или оба) для преодоления сбоя.
- > Следующим шагом является детальная спецификация дизайна и материала. Для этого может потребоваться подробный анализ напряжений, анализ динамики системы, ее реакции на температуру и окружающую среду, а также подробное рассмотрение внешнего вида продукта.

Методология проектирования



Адаптировано из M.F. Ashby, D.R. Jones, Engineering Materials. V. I, University of Cambridge, UK

Методология проектирования



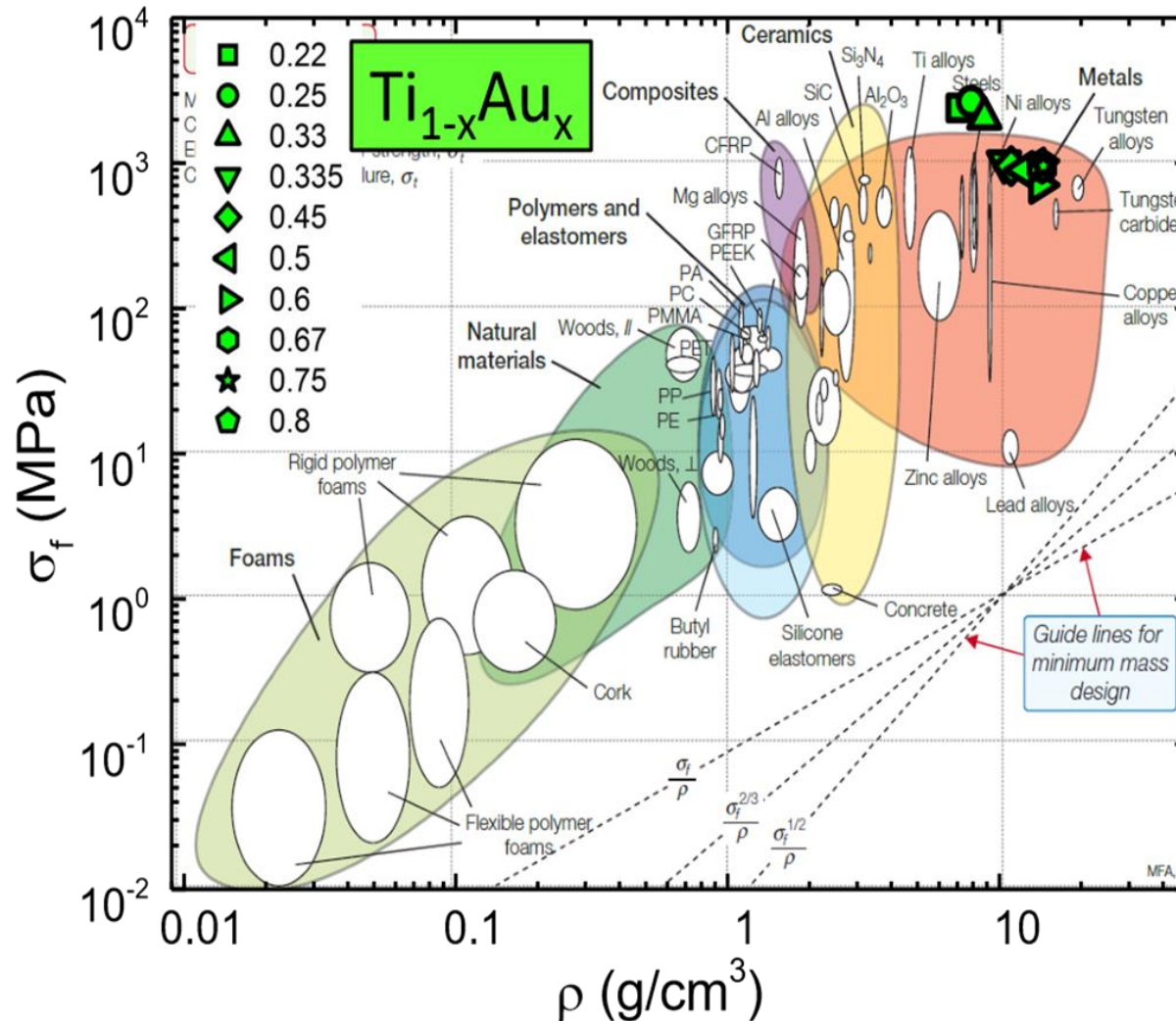
Выбор материала с применением диаграмм Эшби

- Выбор материала - это шаг в процессе проектирования любого физического объекта. В контексте дизайна продукта основная цель выбора материала - минимизировать затраты при достижении целей производительности продукта. Систематический выбор лучшего материала для конкретного применения начинается с свойств и стоимости материалов-кандидатов. При выборе материала часто используется индекс материала или индекс производительности, соответствующий желаемым свойствам материала. Например, тепловое одеяло должно иметь плохую теплопроводность, чтобы минимизировать теплопередачу при заданной разнице температур. Крайне важно, чтобы дизайнер хорошо знал свойства материалов и их поведение в рабочих условиях. Некоторые из важных характеристик материалов: прочность, долговечность, гибкость, вес, устойчивость к нагреву и коррозии, способность к литью, сварке или закалке, обрабатываемость, электропроводность и т.д.
- График Эшби, названный в честь Майкла Эшби из Кембриджского университета, представляет собой диаграмму рассеяния, которая отображает два или более свойств многих материалов или классов материалов. Эти графики полезны для сравнения соотношения между различными свойствами. Для примера жесткой / легкой детали, описанной выше, модуль Юнга будет находиться на одной оси, а плотность - на другой оси, с одной точкой данных на графике для каждого материала-кандидата. На таком графике легко найти не только материал с наибольшей жесткостью или наименьшей плотностью, но и материал с наилучшим соотношением E / ρ .

Диаграмма Эшби

График Эшби, названный в честь *Майкла Эшби* из Кембриджского университета, представляет собой диаграмму рассеяния, которая отображает два или более свойств многих материалов или классов материалов. Эти графики полезны для сравнения соотношения между различными свойствами. Для примера жесткой / легкой детали, модуль Юнга будет находиться на одной оси, а плотность - на другой оси, с одной точкой данных на графике для каждого материала-кандидата. На таком графике легко найти не только материал с наибольшей жесткостью или наименьшей плотностью, но и материал с наилучшим соотношением E / ρ . Использование логарифмической шкалы по обеим осям облегчает выбор материала с наилучшей жесткостью пластины E / ρ . Цвета представляют семейства материалов.

Пример применения диаграммы Эшби

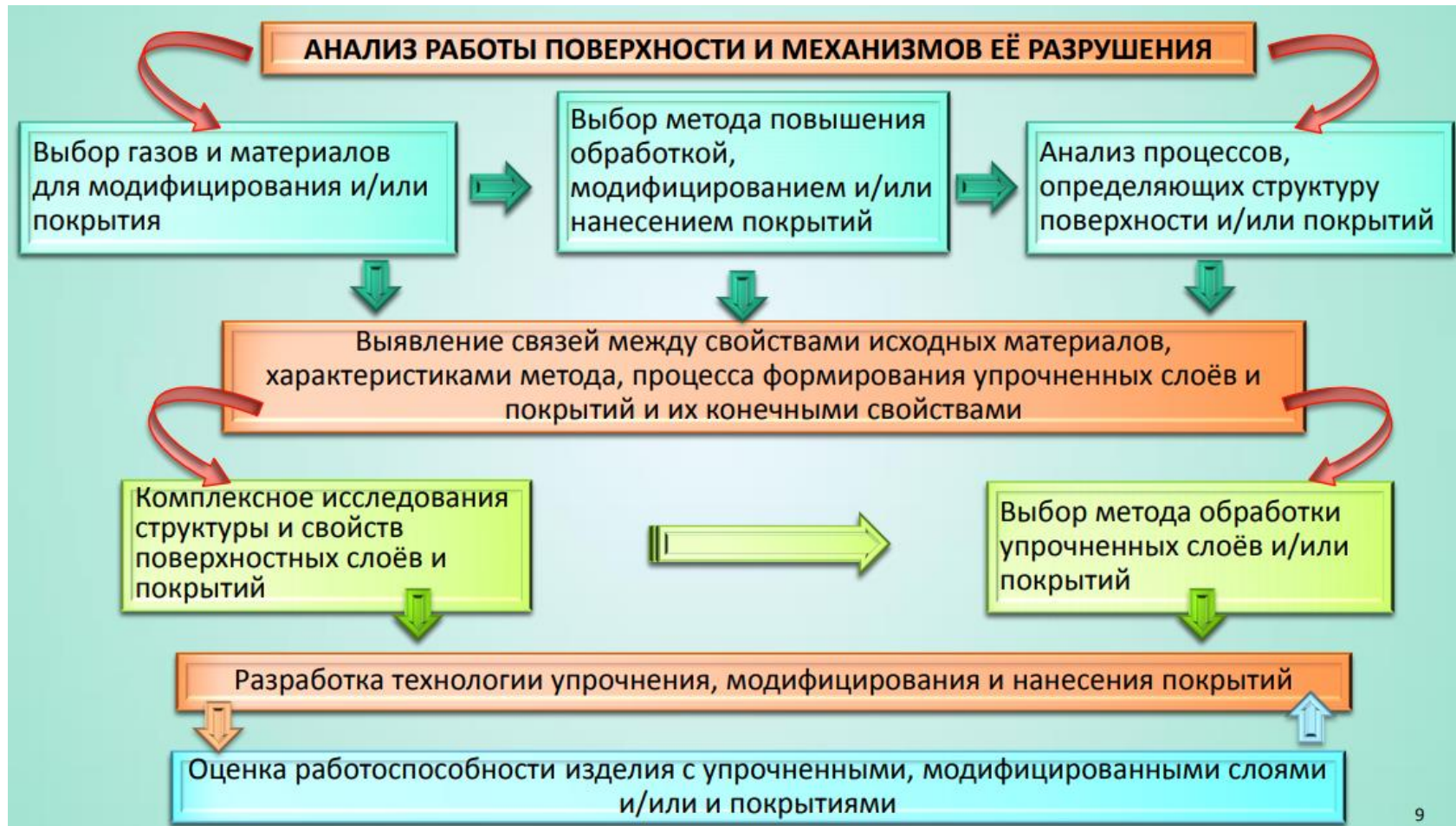


E. Svanidze, T. Besara, M. F. Ozaydin, Yan Xin, K. Han, H. Liang, T. Siegrist, E. Morosan, $\text{Ti}_{1-x}\text{Au}_x$ alloys: hard biocompatible metals and their possible applications. <https://arxiv.org/abs/1410.7308>

Практические рекомендации

- Требуются более качественные данные о свойствах материала у возможных поставщиков или самостоятельные испытания
- Конструкция является жизнеспособной только если она может быть изготовлена экономно. Выбор способа изготовления во многом определяется выбором материала
- Производственный маршрут зависит от размера производственного цикла и от того, как компонент будет завершён и присоединён к другим компонентам
- Выбор материала и пути производства определяют цену продукта, поэтому может потребоваться вторая итерация, если калькуляция показывает, что цена слишком высока
- Возможно, придётся рассмотреть новый выбор материала или конструкции компонента, позволяющий создать альтернативный путь производства
- На этом этапе производится прототип продукта и оценивается его эффективность на рынке. Если удовлетворительно, устанавливается полномасштабное производство
- Непрерывный анализ производительности компонента выявляет слабые стороны или способы его улучшения или удешевления
- Всегда есть возможности для дальнейших инноваций: радикально нового дизайна или изменения материала, из которого сделан компонент
- **Успешные разработки постоянно развиваются, и только так продукт сохраняет конкурентные позиции на рынке**

Методологические основы проектирования изделий с покрытиями



Характеристики сварного шва, дающие неблагоприятные усталостные свойства

Описание	Комментарии
Изменение в сечении сварного шва	Дает концентрацию напряжения. В случае стыковых сварных швов она может быть устранена шлифованием сварного шва до появления основного металла. Шлифовальные метки должны быть параллельны направлению нагрузки, в противном случае они могут инициировать усталостные трещины
Плохая обработка поверхности сварного шва	Иницирует усталостные трещины. Улучшить отделку шлифовкой
Наличие растягивающих остаточных напряжений такой же величины, что и предел текучести	Шов склонен к усталости даже при применении полностью сжимающего цикла напряжений. Уменьшить остаточные напряжения снятием напряжения, ковка или дробеструйное упрочнение
Часто содержат дефекты (водородные трещины, шлаковые включения, старт-стоп отметки)	Иницирует усталостные трещины. Критические сварные швы проверить неразрушающим методом и дефекты зачистить
Большие различия в микроструктуре между основным металлом, термической зоной и сварным швом	Резкие изменения механических свойств ведут к локальным концентрациям напряжения

Расчет фазовых диаграмм по методу CALPHAD

Метод широко и успешно применяется в материаловедении десятилетиями. При использовании метода CALPHAD интегральная энергия Гиббса, включая энтальпию и энтропию каждой фазы, термодинамически моделируется и оценивается как функция температуры, давления и состава в системах низкого порядка. Термодинамические равновесия определяются минимизацией энергии Гиббса всей системы, включая все возможные фазы. Используя конкретный вычислительный инструмент CALPHAD (например Thermo-Calc) вместе с самосогласованной термодинамической базой данных, термодинамические свойства и фазовые равновесия в бинарной и тройной, а также многокомпонентных системах могут быть рассчитаны на основе гиббсовской термодинамики.

Lukas H.L. ; Фри Сюзана Г. ; Сундман Бо (2007). *Вычислительная термодинамика: метод CALPHAD*. Кембридж: Издательство Кембриджского университета. [ISBN 978-0521868112](#). [OCLC 663969016](#).

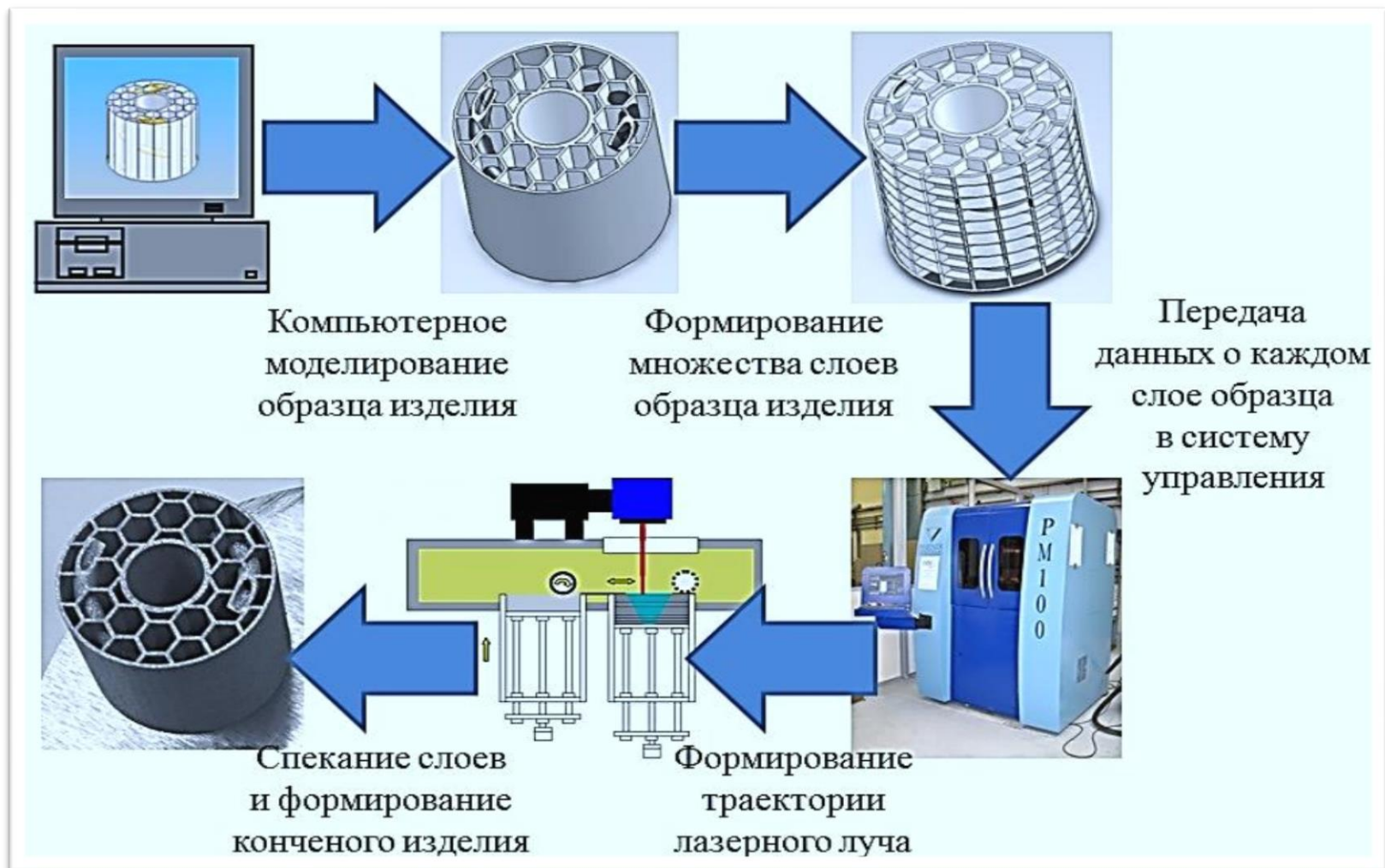
CALPHAD

- CALPHAD (аббр. от англ. CALculation of PHase Diagrams) — метод расчёта фазовых диаграмм, предложенный Л. Кауфманом в 1960-х годах. Под равновесными фазовыми диаграммами обычно понимают диаграммы зависимости состава химической системы от температуры. На фазовой диаграмме отмечаются области существования соединений и растворов (то есть фаз) и области их сосуществования. Фазовые диаграммы — очень мощный инструмент для прогнозирования состояния системы при различных условиях. Впервые они появились как графический метод обобщения экспериментальной информации о равновесии. В сложных системах вычислительные методы, такие как CALPHAD, используются для моделирования термодинамических свойств для каждой фазы и моделирования поведения многокомпонентной системы в целом. Подход CALPHAD базируется на том факте, что фазовая диаграмма — это проявление равновесных термодинамических свойств системы, которые слагаются из свойств составляющих систему фаз. Таким образом, существует возможность расчёта фазовой диаграммы путём начальной оценки термодинамических свойств всех фаз системы.

CAD/CAM/CAE

- **CAD-системы** (computer-aided design – компьютерная поддержка проектирования) - программное обеспечение, которое автоматизирует труд инженера-конструктора и позволяет решать задачи проектирования изделий и оформления технической документации при помощи персонального компьютера
- **CAM-системы** (computer-aided manufacturing – компьютерная поддержка изготовления) автоматизируют расчеты траекторий перемещения инструмента для обработки на станках с ЧПУ и обеспечивают выдачу управляющих программ с помощью компьютера
- **CAE-системы** (computer-aided engineering – компьютерная поддержка инженерных расчетов) - для решения различных инженерных задач (расчет конструктивной прочности, анализ тепловых процессов, расчет гидравлических систем и механизмов)
- **CAD/CAM/CAE** системы развиваются уже несколько десятилетий. За это время произошло разделение систем на уровни
 - **верхний** – системы обладают огромным набором функций и возможностей, но с ними тяжелее работать
 - **нижний** - имеют ограниченные функции, но очень просты в изучении
 - **средний** - обеспечивают пользователя инструментами, достаточными для решения большинства задач, не сложны для изучения и работы

Аддитивные технологии



Биодизайн

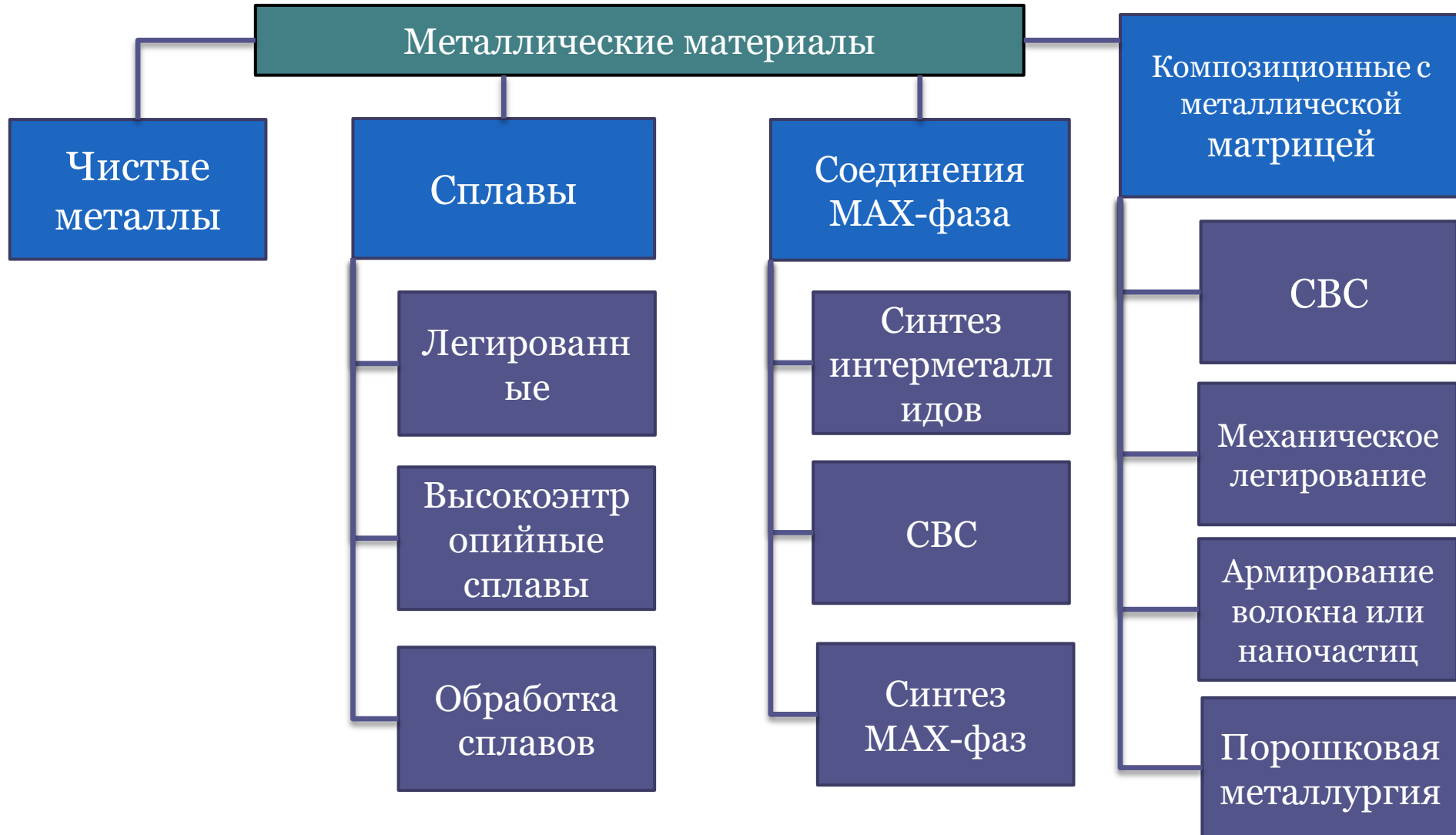
- Бионический (топонимический, генеративный) дизайн - способ проектирования различных объектов, при котором для снижения веса и увеличения прочности применяются нетрадиционные решения. Внешне такие объекты отличаются от обычных техногенных изделий. Они имеют выраженные черты, присущие растениям, имитируют строение конечностей или костей.
- Метод предполагает использование в конструкциях эффективных решений позаимствованных в природе. В целом, это плавные линии, распределенная структура тонких сплошных или трубчатых конструкций. Биодизайн - частный случай топологической оптимизации.
- Топологическая оптимизация – изменение конструкции детали и ее варьирующихся параметров с улучшением ее функционала. Позволяет адаптировать геометрию под определенную технологию (как традиционную, так и 3D-печать), создавать сложные структуры и сокращать число единиц в сборке.



Металлургия в аддитивных технологиях

Металлургия (область науки и техники, охватывающая процессы получения металлов из руд или других видов сырья, а также процессы, связанные с изменением химического состава, структуры и свойств металлических сплавов и производством разнообразных металлических изделий из них) в настоящее время имеет развитые знания и представления о процессах, формируемой структуре, свойствах и характеристиках изделия, получаемых традиционными методами. В тоже время, в случае широкого применения печати металлами этих традиционных знаний недостаточно. Связано это с тем, что обсуждаемые возможности 3Д печати обусловлены не только с разнообразием материалов, применяемых для печати, но и специфических возможностей выращивания изделий из отдельных кристаллов, формированием специфических свойств в выбранных зонах печати, получением гетерогенных и слоистых и т.п. структур и текстуры материала. При этом, принципиально важным является тот факт, что материал формируется в процессе изготовления изделия.

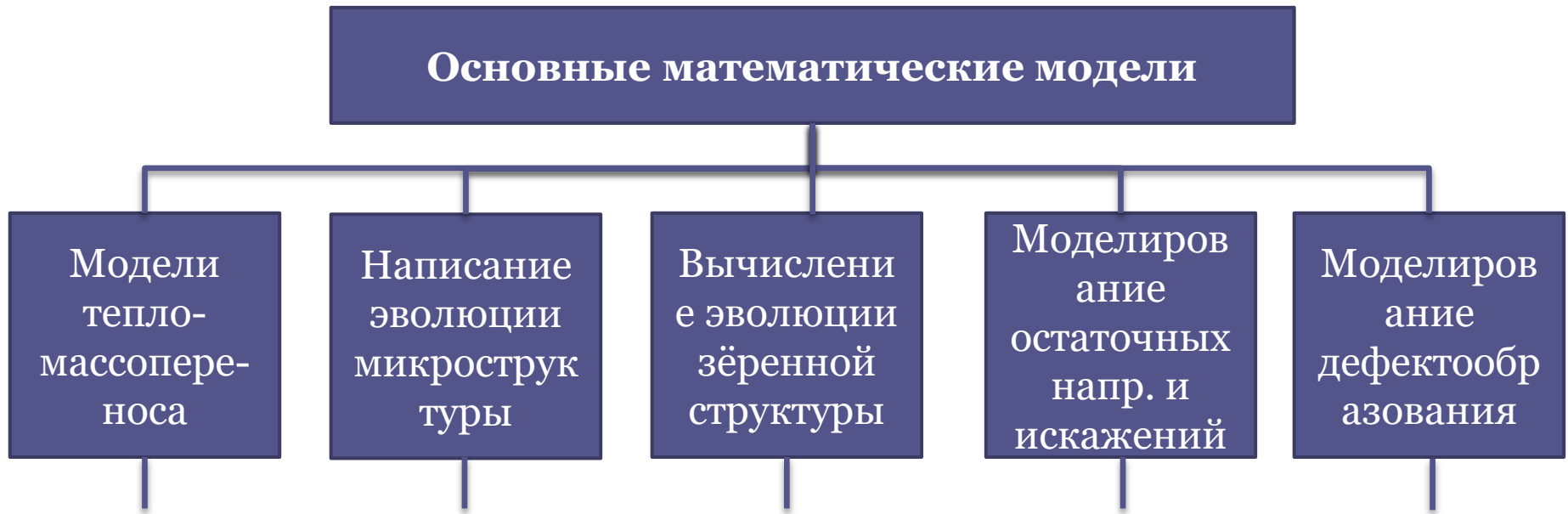
Классификация металлов, применяемых в аддитивных технологиях



Математическое моделирование

- **Механистические модели включают** вычисления таких переменных как температурные поля и поля скоростей, скоростей охлаждения и параметров отверждения, которые практически сложно измерить при АТ. Эти модели обеспечивают феноменологическое описание того, как микроструктура и свойства напечатанной детали развиваются при изменчивости процессов и термофизических свойств фидстоков.
- **Феноменология** — термин, используемый в естествознании, в особенности **в физике**, для обозначения совокупности знаний, определяющих взаимосвязь между различными наблюдениями явлений (феноменов) в соответствии с фундаментальной теорией, но непосредственно из **этой** теории не следующих.
- Однако математические представления процессов и сопутствующим им характеристик является достаточно сложным делом. Эта сложность проявляется почти всегда при моделировании большинства важных физических процессов и игнорировании менее важных процессов. Эти допущения в компромисс точности, степень которых проверяется при сравнении данных полученных при предсказывающей модели и экспериментальными результатами. В дополнение, цель усиливается часто использованием опыта построения моделей наплавления и металлургии.
- Механистические модели аддитивного производства широко использованы для предсказания соотношений между переменными процесса и характеристиками детали.

Основные математические модели



Машинное обучение

- **Машинное обучение (*Machine learning*)** даёт возможность компьютерам осуществлять надёжное предсказание на основании изучения данных собранных из различных источников. Полезная информация и соотношения извлекаются из большого количества источников без феноменологических описаний или прямого программирования. Точность предсказания улучшается с качеством и объёмом данных. Доступность мощных открытых источников программ способствует их использования для решения сложных проблем в 3D принтинге, которые могут возникать сначала как трудноразрешимые.
- Зачем это нужно?
- Построение высококачественных деталей методом проб и ошибок перебором многого количества переменных процессов является не быстрым и не экономически эффективным.
- Машинное обучение может служить хорошим инструментом для предсказания микроструктуры, свойств и дефектов.

Машинное обучение

Модели машинного обучения

```
graph TD; A[Модели машинного обучения] --- B[Искусственные нейросети]; A --- C[Дерево решений]; A --- D[Метод опорных векторов]; A --- E[Байсовская сеть и классификация]; A --- F[Метод ближайших соседей]; A --- G[Метод «случайный лес»];
```

Искусственные
нейросети

Дерево
решений

Метод
опорных
векторов

Байсов-
кая сеть и
классифи-
кация

Метод к-
ближай-
ших
соседей

Метод
«случай-
ный лес»

Спасибо за внимание!