

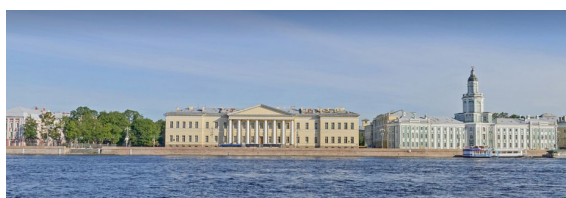
СПбГУ и СПбНЦ РАН



ТЕЗИСЫ

II Школы-семинара

**«Механика, химия
и новые материалы»**



**25 – 26 сентября, 2023
г. Санкт-Петербург
Университетская наб., 5**



Докладчики

Агеев С.В.	4
Антонова М.Н.	5
Бауэр С.М.	5
Босяков С.М.	6
Валиев Р.З.	7
Григорьева А.В.	7
Груздков А.А.	8
Еникеев Н.А.	9
Казаков А.М.	10
Китаева Д.А.	10
Корзникова Г.Ф.	11
Корзникова Е.А.	12
Кузькин В.А.	13
Кукушкин С.А.	13
Литвинов В.Л.	15
Лопатина Е.С.	16
Лукашов Р.В.	17
Орехов А.В.	17
Полянский В.А.	18
Редьков А.В.	19
Рудакова А.В.	20
Семёнов К.Н.	21
Сизиков В.С.	21
Смирнов Е.В.	22
Стародубова М.С.	23
Телятник Р. С.	24
Товстик Т.П.	25
Тыщенко А.А.	26
Ульянов А.А.	27
Фрейдин А.Б.	27
Фролов М.М.	28
Чернышов М.В.	28
Чуйков Н.С.	30
Шилько С.В.	31
Шисян Чжао	32
Шишов А.Ю.	32
Юрьев Г. О.	33
Язовцева О.С.	34



ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:

Петров Ю.В., чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., СПбГУ, Санкт-Петербург

Сопредседатели:

Д. Баоцян Ли, проф.

Харбинский Политехнический Университет, Харбин, Китай

Валиев Р.З., д.ф.-м.н., СПбГУ-УУНиТ,

Санкт-Петербург - Уфа

Ученый секретарь:

Каштанова С.В., к.ф.-м.н., с.н.с. СПбГУ

Помощники председателя:

Пименова Т.Ф., к.х.н., СПбНЦ РАН

Магомедова Д.К., н.с. СПбГУ

Члены орг. комитета:

Атрошенко С.А., д.ф.-м.н., ИПМаш РАН

Волков А.Е., д.ф.-м.н., СПбГУ

Еникеев Н.А., д.ф.-м.н., СПбГУ-УУНиТ

Мухортов Д.А., к.т.н., РНЦ «Прикладная химия»

Орлова М.И., д.б.н., СПбНЦ РАН

Пашкевич Д.С., д.т.н., СПбПУ

Полянский В.А., д.ф.-м.н., ИПМаш РАН

Помыткин С.П., д.ф.-м.н., ГУАП

Семёнов Б.Н., к.ф.-м.н., СПбГУ

Скорб Е.В., к.х.н., Университет «ИТМО»

Чернышов М.В., д.т.н., БГТУ «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова

*Мероприятие организовано в рамках мегагранта
(Соглашение 075-15-2022-1114 от 30 июня 2022 г.)
при поддержке Правительства РФ (Постановление 220)*



ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕМОСОВМЕСТИМОСТИ НАНОКОНЬЮГАТА НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА С ФОЛИЕВОЙ КИСЛОТОЙ И ЦИТОСТАТИЧЕСКИМ ПРЕПАРАТОМ ЦИТАРАБИНОМ

Агеев С.В., Андоскин П. А., Семёнов К. Н., Шаройко В. В.

*Первый Санкт-Петербургский государственный
медицинский университет им. акад. И.П. Павлова*

Целью работы является исследование биосовместимости наноматериала на основе оксида графена (GO) с повышенным содержанием кислородсодержащих функциональных групп (до 85 %), функционализированного фолиевой кислотой (FA) и цитостатическим агентом цитарабином (Cyt) (GO-FA-Cyt). Было проведено изучение гемосовместимости синтезированного наноматериала, включающее исследование АДФ-индуцированной агрегации тромбоцитов и спонтанного гемолиза; антиоксидантных свойств и связывания с биомолекулами (человеческим сывороточным альбумином (ЧСА) и ДНК).

Степень гемолиза в присутствии GO-FA-Cyt в концентрационном диапазоне 0.45–45 мг·л⁻¹ (в пересчёте на загрузку Cyt) не превышает 0.5 %. АДФ-индуцированная агрегация тромбоцитов в присутствии GO-FA-Cyt незначительно увеличивалась по сравнению с контролем в условиях эксперимента. Полученный конъюгат проявляет антирадикальную активность в диапазоне 4.5–45 мг·л⁻¹ (в пересчёте на загрузку Cyt) в модельных системах в реакции со стабильным радикалом 2,2-дифенил-1-(2,4,6-тринитрофенил)гидразин-1-илом (ДФПГ) и в реакции по захвату NO-радикалов. Связывание GO-FA-Cyt с ЧСА происходит в субдомене IB (сайт связывания дигитонина), а также в субдомене IIА (сайт связывания варфарина). Константа связывания GO-FA-Cyt с ДНК составила $(6.0 \pm 0.5) \cdot 10^2$ л·г⁻¹, при этом данная величина составляет 26.0 ± 2.3 л·г⁻¹ для немодифицированного GO. Очевидно, конъюгация GO с Cyt и FA приводит к усилению взаимодействия с ДНК [А. О. Е. Abdelhalim, А. А. Meshcheriakov, D. N. Maistrenko, O. E. Molchanov, S. V. Ageev, D. A. Ivanova, N. R. Iamalova, M. D. Luttsev, L. V. Vasina, V. V. Sharoyko, K. N. Semenov. Graphene oxide enriched with oxygen-containing groups: on the way to an increase of antioxidant activity and biocompatibility // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. 2022, V. 210, P. 112232].

Работа выполнена при поддержке Министерства здравоохранения РФ. Наименование проекта: «Разработка молекулярного дизайна и создание препаратов на основе конъюгатов углеродных наноструктур, векторов адресной доставки и цитотоксических агентов для инактивации стволовых опухолевых клеток и компонентов микроокружения опухоли», ЕГИСУ: 123021300231-8.



МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ ЗУБА ТЕКУЧЕСТИ И ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ЗЕРНА НА ВЕЛИЧИНУ ИНКУБАЦИОННОГО ВРЕМЕНИ

Антонова М.Н.¹, Чжао Ш.¹, Петров Ю.В.^{1,2}, Женг М.³, Ли Б.^{1,3}

¹Санкт-Петербургский государственный университет,

²Институт проблем машиностроения РАН,

³School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology

В данной работе представлена модифицированная релаксационная модель пластичности на основе ранее разработанного подхода инкубационного времени, которая отражает немонотонную зависимость напряжения от деформации, что позволяет объяснять и прогнозировать появление и исчезновение зуба текучести, наблюдаемое во многих металлических материалах, подвергающихся относительно низким скоростям нагружения. Явление зуба текучести характеризуется отчетливым снижением напряжения на начальной стадии пластической деформации. На основе экспериментальных данных для нитевидных кристаллов серебра и меди, а также магниевых сплавов Mg–0,3Ca (мас.%) и Mg–1,0Al–1,0Ca–0,4Mn (мас.%) с различными размерами зерен, сравниваются результаты работы модифицированной и исходной релаксационных моделей пластичности. Показано, что модифицированная модель позволяет лучше описывать процесс деформации, сопровождающийся деформационным упрочнением.

На примере магниевых сплавов отмечается, что размер зерна может привести к нестабильности диаграмм деформирования наряду со скоростью деформации и температурой, что может повлиять на изменения величины инкубационного времени. В результате выявлена заметная тенденция к увеличению инкубационного времени по мере уменьшения размера зерна. Даная закономерность наблюдается для двух разных магниевых сплавов, размер зерна которых регулировался различными способами: либо за счет изменения скорости экструзии, либо за счет изменения длительности обработки отжигом. Обратную зависимость между инкубационным временем и размером зерна можно объяснить увеличением количества границ зерен с уменьшением размера зерна, что препятствует иницированию пластического течения и движению дислокаций и требует дополнительного времени для протекания этих процессов при той же скорости нагружения. Исследование взаимосвязи между инкубационным временем и размером зерна дает ценную информацию о динамических механических свойствах наноструктурированных материалов при различных скоростях деформации.

Исследование выполнено при поддержке мегагранта № 075-15-2022-1114.

ИНТРАВИТРЕАЛЬНЫЕ ИНЪЕКЦИИ. МЕХАНИЧЕСКИЙ АСПЕКТ

Бауэр С.М.

Санкт-Петербургский государственный университет

Известно, что в последнее время интравитреальные инъекции широко используются при лечении глазных заболеваний. К этому привело внедрение новых медицинских препаратов. Естественно, что после внезапного увеличения внутриглазного объема в ходе



инъекции резко увеличивается внутриглазное давление. Даже кратковременное увеличение ВГД выше определенного индивидуального уровня может привести к нарушению кровообращения на сетчатке и в диске зрительного нерва, поэтому важно в каждом конкретном случае оценить возможный уровень изменения ВГД в результате инъекции и риск для отдельного пациента.

Следует подчеркнуть, что необходимо различать резкое *кратковременное* повышение ВГД непосредственно после введения инъекции, которое зависит от механических параметров инъекции, биометрических параметров глазного яблока и биомеханических свойств его структур, а также *долговременное* повышение ВГД, которое может быть вызвано именно химическим составом введенного препарата и его побочным патофизиологическим воздействием.

В данном докладе обсуждаются биомеханические факторы, которые необходимо учитывать при интерпретации клинических данных, связанных с непосредственным повышением внутриглазного давления после интравитреальных инъекций.

ОЦЕНКА БОЛЕВЫХ ОЩУЩЕНИЙ В СЛИЗИСТОЙ ОБОЛОЧКЕ ПРИ ДЕЙСТВИИ ЖЕВАТЕЛЬНОЙ НАГРУЗКИ НА ПОЛНЫЙ ПРОТЕЗ НИЖНЕЙ ЧЕЛЮСТИ

Босяков С.М.¹, Назаренко Д.В.¹, Рубникович С.П.²

¹ *Белорусский государственный университет*

² *Белорусский государственный медицинский университет*

Оценка реакция тканей нижней челюсти на жевательную нагрузку, действующую на зубные протезы, представляет собой актуальную задачу стоматологии. Целью настоящей работы является разработка подхода к оценке болевых ощущений, возникающих у пациентов после тотального протезирования нижней челюсти, при пережевывании продуктов питания различной жесткости.

Параметризованная конечно-элементная модель нижней челюсти с протезом разработана на основании томографических данных. Толщина слизистой оболочки равна 3,0 мм и 2,0 мм; толщина кортикальной костной ткани в среднем составляет 3,4 мм. Полный протез нижней челюсти фиксировался на двух сферических имплантатах. Прикладываемая к протезу нагрузка и граничные условия имитировали действие мышечных сил и продуктов питания, соответствующие физиологической жевательной нагрузке. Предполагалось, что продукты питания располагаются (слева) в области второго премоляра и первого моляра нижней челюсти, первого и второго премоляров, а также второго резца и клыка. Расчет выполнен с использованием программного обеспечения ANSYS Workbench 22 R1 (Ansys Inc., USA). В результате конечно-элементного расчета определены гидростатические напряжения в слизистой оболочке для двух моделей нижней челюсти с протезом при трех различных вариантах расположения продуктов питания. Величина окклюзионных сил соответствовала усредненным значениям усилий, необходимым для дробления продуктов различной жесткости (моркови, орехов различной величины, шоколада и вареного мяса).

Показано, что при расположении продуктов питания различной жесткости в области второго резца и клыка в слизистой оболочке различной толщины возникают гидростатические напряжения, превышающие болевой порог. Болевые ощущения также могут возникнуть в случае дробления моркови и орехов при их расположении в области пятого и шестого зубов. Наименьшие гидростатические напряжения наблюдаются в



слизистой оболочке при пережевывании продуктов питания частью протеза, соответствующей области первого и второго премоляра.

Работа выполнена в рамках задания 1.7.1.4 «Разработка дифференциальных и мелко-дифференциальных методов и их применение к моделированию сложных биомеханических и экономических систем ГПНИ «Конвергенция».

УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫЕ МАТЕРИАЛЫ: ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ ИННОВАЦИЙ

Валиев Р.З.

*Санкт-Петербургский государственный университет
Уфимский университет науки и технологий*

Многочисленные исследования последних лет свидетельствуют, что наноструктурирование металлов и сплавов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) открывает возможность значительного повышения их механических и функциональных свойств. Использование методов ИПД позволяет создавать металлические материалы с ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой, имеющей средний размер зерен на наноуровне и содержащие нанодисперсные особенности в виде наночастиц вторых фаз, нанодвойников и необычных сегрегаций легирующих элементов на границах зерен. Результатами такого формирования УМЗ структур является изменение механизмов деформации и упрочнения в материалах, что позволяет реализовать в них необычные механические свойства – сверхпрочность, сверхпластичность, очень высокие усталостную прочность и износостойкость. В докладе рассмотрены примеры демонстрации таких перспективных свойств на ряде промышленных материалов – легких сплавах на основе Al, Mg и Ti и нескольких сталях.

Особый интерес представляет использование ИПД обработки для создания наноматериалов с так называемыми многофункциональными свойствами, сочетающими высокие механические и функциональные свойства (коррозионная, эрозионная и радиационная стойкость, электропроводность и т.д.) Представлены основные подходы к моделированию и достижению стабильности наноструктур в экстремальных условиях. Обсуждаются применения наноматериалов в инновационных разработках, направленных на их широкое использование в энергетике, медицине и технике.

ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА АКУСТИЧЕСКОГО ТРАКТА ОТ ДЕФЕКТА ДО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ В ТОНКОСТЕННОМ СТАЛЬНОМ СОСУДЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

Григорьева А.В., Максименко М.В.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербургский Горный Университет*

Авторами разработана модификация метода планарной локации, позволяющая вычислять скорость каждого сигнала акустической эмиссии (АЭ), который генерируют



источники АЭ в материале производственного объекта исследования в процессе его нагружения. Приведены аналитический и численный способы решения, учтена особенность перехода от пространственной задачи к плоской, при которой преобразователи акустической эмиссии (ПАЭ), зарегистрировавшие сигнал АЭ, находятся по разные стороны от линии разреза развертки цилиндра. Показано, что разработанный метод позволяет уменьшить влияние погрешностей локации сигнала АЭ, связанных с заданием скорости звука одинаковой для всех сигналов АЭ; анизотропией скорости распространения сигнала АЭ; регистрацией ПАЭ волн различных типов то есть учитывает многомодовость акустического сигнала.

Известно, что в одном испытании реальная скорость распространения АЭ волн от различных источников может существенно различаться (это зависит от их природы, от затухания и т.д.), в связи с этим предлагается модифицировать предложенный метод, включающий комплекс численных методов, следующим образом. Пусть скорость распространения сигнала от источника до 1-го ПАЭ, зарегистрировавшего сигнал будет v_1 (см/мс), а до остальных сработавших ПАЭ v_2 (см/мс). Для того, чтобы применить разработанный метод, необходимо дополнить систему уравнений триангуляции еще одним уравнением, так как неизвестных величин стало 5 (x, y, v_1, v_2, t).

Полученную систему уравнений авторы предлагают решать численными методами, подробно описанными в их ранних работах. Эта модификация предложенной постановки задачи учитывает не только анизотропию скорости распространения сигнала, но и тот факт, что ПАЭ на различном расстоянии от источника сигнала могут регистрировать волну двух типов (Лэмба и Рэлея), имеющих различную скорость.

ЗАПАЗДЫВАНИЕ ТЕКУЧЕСТИ И НОВЫЕ ПОДХОДЫ К АНАЛИЗУ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Груздков А.А.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт

Одним из магистральных направлений современной науки является разработка и создание новых перспективных материалов, в том числе с уникальными прочностными свойствами. Следует, однако, учитывать, что улучшение одних свойств материала может сопровождаться существенным ухудшением других. Новые материалы, поэтому, следует испытывать в широком диапазоне параметров внешнего воздействия. Возможно, именно этим обстоятельством обусловлено возобновление интереса к относительно несложным методам испытаний материалов, таких как тест Тейлора (удар стержня о жёсткую преграду), предложенный ещё в 1946 году.

В рамках традиционных подходов переход материалов из упругого состояния в пластическое рассматривается как критическое событие, происходящее в момент, когда уровень напряжений в материале достигает критического значения (предел текучести). В случае быстроизменяющихся параметров нагружения предлагается экспериментально определять скоростную зависимость предела текучести, которая в последствие должна использоваться в компьютерных программах.

Недостатки такого подхода проявляют себя, в частности, при анализе результатов испытаний по методу Тейлора, где условие постоянства скорости деформации не выполнены даже приближённо. Более корректным представляется понимание упруго-



пластического перехода, как результата подготовительных процессов в структуре материала, имеющих характерную длительность (инкубационное время). В этом случае результаты ударных испытаний следует трактовать как проявления эффекта «запаздывания текучести», который можно моделировать критерием текучести, основанным на понятии инкубационного времени.

РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ НАНОСТРУКТУРНЫХ МАТЕРИАЛОВ: ИСТОРИЯ И ПОСЛЕДНИЕ ДОСТИЖЕНИЯ

Еникеев Н.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Уфимский университет науки и технологий*

Повышение долговечности, безопасности и надежности существующих и будущих ядерных реакторов требует разработки новых материалов с заметно улучшенными функциональными свойствами, как с точки зрения механического поведения, так и устойчивости к облучению. Одним из многообещающих решений этой проблемы является микроструктурный дизайн. Идея этого подхода заключается в увеличении плотности внутренних стоков для радиационно-внесённых точечных дефектов, в частности, границ зерен, обладающих способностью поглощать вакансии и межузельные атомы, что может значительно улучшить радиационную стойкость.

В докладе рассматриваются исследования влияния облучения на структуру нанокристаллических материалов, которые продемонстрировали их гораздо более высокое сопротивление к радиационному повреждению по сравнению с их крупнозернистыми аналогами. Данные, представленные в многочисленных публикациях, подтвердили, что уменьшение размера зерна может быть эффективным стратегией разработки новых радиационно-стойких материалов. В последние десятилетия материаловеды акцентировали внимание на методе измельчения микроструктуры металлических материалов при помощи интенсивной пластической деформации (ИПД). ИПД материалы характеризуются субмикронным размером зёрен; в отдельных случаях зёрна могут быть измельчены до нанометрических размеров. Сочетание в ИПД материалах ультрамелкозернистой (УМЗ) микроструктуры с наноструктурными особенностями, обеспечивает значительное улучшение их механических и функциональных свойств. Целенаправленное управление наноструктурными параметрами может обеспечить дополнительные возможности для проектирования улучшенных многофункциональных свойств УМЗ материалов, включая радиационную стойкость. В докладе представлен обзор исследований изменения структуры и свойств УМЗ материалов, полученных ИПД, в результате облучения. Показано, что измельчение зёрен может быть мощным средством для создания передовых радиационно-стойких материалов. В целом, объемные УМЗ металлы и сплавы, полученные с помощью ИПД, демонстрируют превосходные механические характеристики и улучшенную стойкость к модельному и нейтронному облучению.



МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИСЛОКАЦИЙ С РАДИАЦИОННЫМИ ДЕФЕКТАМИ В ВОЛЬФРАМЕ

Казakov А.М., Шарапова Ю.Р., Корзникова Е.А.

Уфимский университет науки и технологий

В металлургии высокая прочность конструкционных материалов может быть достигнута за счет различных механизмов упрочнения: упрочнение твердым раствором, дислокационное упрочнение, фазовые превращения и т.д. Среди таких механизмов особенно выделяется дисперсионное упрочнение. Чаще всего осажденная фаза представляет собой интерметаллид, который является некогерентным по отношению к основной матрице. Именно такие частицы наиболее эффективно препятствуют движению дислокаций и вызывают наиболее сильный эффект упрочнения. Помимо упрочнения, выделения дисперсных частиц приводит к нежелательному охрупчиванию, что может привести к негативным последствиям при эксплуатации материалов при экстремальных воздействиях. Вольфрам - наиболее часто используемый металл в областях, связанных с облучением и другими экстремальными воздействиями. Под воздействием облучения в металле образуются различные дефекты: поры, дислокационные петли, твердодисперсные фазы. К настоящему моменту взаимодействие дислокаций с подобными дефектами изучено недостаточно, в силу чего исследования в данном направлении являются актуальными.

В работе приводится численный эксперимент с применением метода молекулярной динамики, целью которого является изучение механизма деформационного упрочнения ОЦК вольфрама, которое ассоциировано с взаимодействием краевой дислокации с дефектами. Исследуется влияние температуры, параметров моделирования, размеров и конфигурации дефекта на упрочнение материала.

Работа Ш.Ю.Р. выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УУНиТ» (соглашение №075-03-2023-119/1). Работа К.А.М. поддержана грантом НШ-4320.2022.1.2; К.Е.А. благодарит за поддержку грант РФФИ № 21-12-00275.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННЫХ И СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ АНИЗОТРОПНОГО СПЛАВА 1561 (АМГ61) ПРИ ТЕМПЕРАТУРНО- СКОРОСТНОМ РАСТЯЖЕНИИ

Китаева Д.А.², Пазылов Ш.Т.¹

¹*Кыргызско-Российский Славянский университет*

²*Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого*

Объектом исследования являются закономерности деформационной анизотропии и структурные преобразования текстурированного алюминиевого сплава 1561 (АМГ61).

Сверхпластическая деформация, осуществляемая в определенных температурно-скоростных условиях, представлена в данном исследовании как термомеханический способ снижения структурной и деформационной анизотропии исходно текстурированного материала.



В ходе экспериментов было установлено, что первоначально кругового сечения образцы после испытаний приобретали эллипсообразную форму. Заметно отличающиеся между собой размеры большой и малой осей сечения, совпадающих соответственно с плоскостью и толщиной пластины, свидетельствовали о наличии анизотропии деформационных свойств материала.

Для характеристики изменчивости формы поперечного сечения введен коэффициент анизотропии, представляющий собой отношение деформаций, измеренных по малой и большой осям сечения.

В результате микроструктурного анализа получены результаты, свидетельствующие о зависимости коэффициента анизотропии от структуры сплава. Установлено изменение структурного состояния материала (сплава) в зависимости от термомеханических условий деформирования, заключающееся в преобразовании структуры и формировании равноосных, близких к мелкозернистому состоянию, зерен, которое через изменение показателя анизотропии находит отражение в соответствующих графиках.

Получена закономерность изменения деформационной анизотропии пластической деформации в зависимости от термомеханических условий деформирования, характеризующая особенности деформационного поведения и отражающая структурные преобразования изначально сильно текстурированного листового материала.

Изучение влияния термомеханических условий деформирования на поведение коэффициента анизотропии и изменение структуры сплава позволяет подбирать режимы для изготовления деталей из листового материала с улучшенной структурой.

СТРУКТУРНЫЕ АСПЕКТЫ ФОРМИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ МЕТОДОМ КРУЧЕНИЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Корзникова Г.Ф.¹, Корзникова Е.А.²

¹Институт проблем сверхпластичности металлов РАН

²Уфимский университет науки и технологий

Металломатричные композиты являются классом функциональных материалов, обладающих уникальным сочетанием важных свойств, таких как высокая прочность, коррозионная стойкость, электро- и теплопроводность, термостойкость и износостойкость. Как правило эксплуатационные свойства таких композитов существенно выше свойств исходных компонентов. Способы получения таких композитов и их служебные свойства активно изучаются. Методы порошковой металлургии, используемые обычно для механического легирования и получения композитных материалов, являются многоступенчатыми и приводят к неизбежному загрязнению компонентов и в конечном счете не обеспечивают высокие прочностные характеристики.

Существуют и другие методы изготовления металломатричных композитов, например, пропитка расплавом металла пористой заготовки из дисперсной фазы, литье композитов в которых армирующий каркас формируется из эвтектики и частиц интерметаллидов, формование распылением, литье под давлением или с перемешиванием, накопительная прокатка, сварка взрывом, сварка трением с перемешиванием, и др. Все эти методы предполагают, как правило, использование относительно небольших давлений и повышенных температур в течение длительного времени.



Напротив, метод кручения под высоким давлением основан на предельно большой пластической деформации в квазигидростатических условиях и характеризуется наибольшими сдвиговыми деформациями в материале без разрушения в течение небольшого промежутка времени, что позволяет получать ультрамелкозернистую и нанокристаллическую структуру даже в малопластичных материалах при комнатной температуре. Значительное упрочнение в результате интенсивной пластической деформации обеспечивается суммарным действием нескольких механизмов: зернограничным, дислокационным, твердорастворным и дисперсионным упрочнением.

На примере легких металломатричных композитов на основе алюминия и медноматричных композитов, армированных графеном показано, что варьирование режимов деформирования и термообработки позволяет получить широкий набор структурных состояний с различным уровнем механических свойств.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 23-29-00863, Е.А.К. благодарит за поддержку Министерство науки и высшего образования РФ в рамках ГЗ УУНиТ (№075-03-2023-119).

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НОВЫХ ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Корзникова Е.А.

Уфимский университет науки и технологий

С момента открытия графена в 2004 году двумерные материалы привлекают все больше внимания ученых благодаря своим необычным свойствам. Особое место занимает изучение нелинейной динамики таких материалов, в частности распространения солитонов в разрезе потенциального использования таких материалов для транспорта энергии и массы. Сжимающие солитоны возникают в кристаллах под действием ударной нагрузки и могут передавать энергию на большие расстояния, проявляя при этом слабое демпфирование. Распространение сжимающих солитонов в двумерных (2D) материалах изучено значительно меньше, чем в трехмерных кристаллах. Анализируются механизмы диссипации энергии решеткой. Полученные результаты сравниваются с данными, полученными ранее для графена и нитрида бора, а также с результатами квазистатического сжатия этого материала. Затухание сжимающих солитонов в фосфорене сильнее, чем в графене и нитриде бора, поскольку он имеет более складчатую структуру и, следовательно, больше каналов для диссипации энергии. В целом полученные нами результаты вносят вклад в понимание нелинейной динамики локализованных возбуждений в двумерных материалах.

Работа выполнена при поддержке гранта НШ-4320.2022.1.2.



ОСОБЕННОСТИ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В КРИСТАЛЛАХ НА НАНОУРОВНЕ

Кузькин В.А.

*Институт проблем машиноведения РАН
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого*

Физические законы, управляющие переносом тепла на микро- и наноразмере, существенно отличаются от нашего повседневного опыта. Недавние эксперименты показывают, что закон Фурье, предполагающий линейную зависимость между тепловым потоком и температурным градиентом, может нарушаться. В частности, соблюдается так называемый баллистический режим переноса, при котором тепло распространяется волновым способом. В настоящем докладе представляется теория, описывающая баллистический перенос тепла в гармоническом приближении, и обсуждаются различные особенности этого режима. В частности, показано, что в баллистическом режиме тепло может перетекать от холодного к горячему и что кинетическая температура больше не является единственным скалярным параметром, характеризующим тепловое состояние в элементарном объеме. Баллистический режим также приводит к возникновению новых термомеханических явлений, таких как баллистический резонанс (возбуждение механических вибраций в замкнутой системе за счет колебательного характера изменения температуры) и открывает принципиальную возможность создания тепловых диодов – устройств, проводящих тепло только в одну сторону.

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МЕХАНИКЕ, ФИЗИКЕ И ХИМИИ. ОБРАЗОВАНИЕ И РОСТ ТОНКИХ ПЛЕНОК, НАНОСТРУКТУР И КРИСТАЛЛОВ

Кукушкин С.А.

Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН)

В докладе изложено современное состояние исследований в области фазовых переходов. Дается определение фазовых переходов первого и второго родов. Кратко излагаются теоретические подходы к описанию фазовых переходов второго рода и критических явлений. Рассказывается о различии между фазовыми превращениями первого и второго родов, и критическими явлениями. Рассматривается воздействие внешних полей на фазовые переходы.

Рассказывается о современном состоянии исследований в области термодинамики и кинетики фазовых переходов первого рода в многокомпонентных системах. Излагается новый подход к описанию фазовых переходов первого рода в многокомпонентных и многофазных системах. Выведена общая система уравнений, состоящая из кинетического уравнения на функцию распределения зародышей новой фазы по размерам, уравнений баланса движущих сил фазового превращения и уравнения роста зародышей новой фазы. Например, если зародыши новой фазы растут из однокомпонентных расплавов, то уравнением баланса движущих сил является закон сохранения тепла в расплаве. В случае роста новой фазы из раствора будет два уравнения баланса, а именно уравнение баланса тепла и закон сохранения вещества. При фазовых превращениях в сегнетоэлектрических



кристаллах этим уравнением будет уравнение сохранения дипольного момента в кристалле. При исследовании механического разрушения уравнением баланса будет закон равновесия упругих напряжений в системе. Излагается метод решения сложных нелинейных уравнений, описывающих кинетику фазовых переходов первого рода [1-6].

Особое внимание уделяется проблемам фазовых переходов, происходящих при росте и образовании новых композитных материалов, наноструктур, росте тонких пленок и защитных покрытий. Рассказывается о причинах, приводящих к стеклованию расплавов и образованию аморфной фазы.

Рассматривается изотермическое и неизотермическое Оствальдовское созревание ансамблей многокомпонентных островков новой фазы на поверхности твёрдых тел [7]. Приводится методика расчета областей сосуществования фаз в многокомпонентных системах. Обсуждаются вопросы описания ранних стадий разрушения твердых тел под нагрузкой и изложена микроскопическая теория фазового перехода первого рода в сегнетоэлектриках – сегнетоэластиках, находящихся под совместным воздействием электрических и механических полей.

Рассказывается о природе фазовых превращений, протекающих в наносистемах при воздействии на них различных химических, физических и механических факторов [4-9]. В частности, рассматривается воздействие кислотности среды (РН) и электромагнитного излучения на процессы зарождения новой фазы [9,10].

Затрагиваются проблемы протекания химических реакций под воздействием механических нагрузок и рассказывается о современных проблемах механохимии.

Докладывается о открытии нового метода синтеза эпитаксиальных пленок нанокремнида кремния на кремнии, разработанного на основе механохимического подхода [6, 11]. Разработанный метод основан на замещении части атомов в кремнии на атомы углерода без разрушения кремниевой основы. Впервые в мировой практике реализован метод последовательной замены атомов одного сорта другими прямо внутри исходного кристалла без разрушения его кристаллической структуры. Метод напоминает “генетический синтез” белковых структур в биологии. Качество структуры слоев, полученных данным методом, значительно превосходит качество пленок карбида кремния, выращенных на кремниевых подложках ведущими мировыми компаниями. Метод дешев и технологичен. Открытие данного метода позволяет прямо на кремниевой подложке синтезировать широкий спектр широкозонных материалов, что открывает беспрецедентные условия для создания нового типа приборов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания ФГУП ИПМаш РАН № FFNF-2021-0001.

Литература:

- [1]. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Термодинамика и кинетика фазовых переходов первого рода на поверхности твердых тел // Химическая физика, 1996, т.15, № 9, с.5-104;
- [2]. S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, New phase formation on solid surfaces and thin film condensation // Progress in Surface Science, 1996, v.151, № 1, P.1-107;
- [3]. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Процессы конденсации тонких плёнок // Успехи физических наук, 1998, т. 168, № 10, с.1083-1116.



- [4]. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Фазовые переходы и зарождение каталитических наноструктур под действием химических, физических и механических факторов// Кинетика и Катализ, т.49, № 1, стр. 85-98, (2008)
- [5]. S. A. Kukushkin, Nucleation of pores in brittle solids under load// J. Appl. Phys., 2005, 98, 033503-12.
- [6]. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. Фазовый переход первого рода через промежуточное состояние // ФТТ. Т. 56, (2014), вып. 4, с. 761-768.
- [7]. С.А. Кукушкин, В.В. Слезов, Дисперсные системы на поверхности твердых тел: механизмы образования тонких пленок (эволюционный подход). Спб. Наука. 1996, 304 с.
- [8]. A.V. Osipov, F. Schmitt, S.A. Kukushkin and P. Hess, Kinetic model of coherent island formation in the case of self-limiting growth // Phys. Rev. B (2001) v.64, 421-427.
- [9]. С.А. Кукушкин, С.В. Немна, Влияние pH на кинетику нуклеации в растворах// Доклады Академии Наук, (2001), Т.377, № 6, С.1-5.
- [10]. С.А. Кукушкин, С.В. Немна, Образование и рост металлической пленки в среде с источником вещества, генерируемого светом// Поверхность, (2001), № 4, С.79-83.
- [11]. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. Термодинамика, кинетика и технология синтеза эпитаксиальных слоев карбида кремния на кремнии методом согласованного замещения атомов и его уникальные свойства. (Обзор) // Конденсированные среды и межфазные границы. – (2022). Т. 24, вып. 4. – С. 407–458.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДОБЫЧИ НЕФТИ И ГАЗА НА ОСНОВЕ ПОСТРОЕНИЯ АВТОМОДЕЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ ТИПА БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ ДЛЯ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ

Литвинов В.Л., Литвинова К.В.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Рассмотрена модель двухкомпонентной фильтрации с фазовыми переходами, которая широко используется для решения задач прогнозирования разработки нефтегазовых залежей [1]-[3]. Предполагается, что скорости фильтрации невелики, а массоперенос происходит достаточно интенсивно, так что фазовое равновесие успевает установиться в каждом элементарном объеме. В зависимости от температурно-барических условий двухкомпонентная смесь может находиться как в однофазном, так и в двухфазном состоянии. Во втором случае будем условно считать более плотную фазу жидкой и обозначать соответствующие ей величины индексом L , а менее плотную фазу - газовой фазой и обозначать ее индексом G .

Нелинейные уравнения двухкомпонентной фильтрации демонстрируют свойства уравнений гиперболического, параболического и эллиптического типов. Решения системы уравнений, описывающих фильтрацию, характеризуются наличием сильных и слабых разрывов концентрации, распространяющихся с конечной скоростью. Непредсказуемые изменения состава и фазового насыщения являются одной из проблем при разработке «карбонатизированных» нефтегазоконденсатных месторождений. Автомодельные решения представляют большой интерес как для тестирования численных алгоритмов [2], так и для исследования сложных фильтрационных течений. Такие решения используются для изучения процессов вытеснения нефти водой или сжатым газом. Однако сжимаемость фаз часто играет существенную роль. В данной работе не делается никаких особых



предположений о свойствах жидкостей, т.е. жидкости могут быть как сжимаемыми, так и несжимаемыми, а в системе происходят фазовые переходы.

Список литературы:

1. Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Самарская Е.А., Тишкин В.Ф. Методы математического моделирования окружающей среды. - М : "Наука", 2000, 254 с.
2. Литвинов В.Л., Литвинова К.В. «Построение автомодельных решений двухкомпонентных уравнений фильтрации при моделировании добычи нефти и газа», Геометрические методы в теории управления и математической физике. III Международная научная конференция (Рязань, 26–30 апреля 2021 г.). стр. 61–62.
3. Брусиловский А.И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа - "Грааль", 2002 г.

КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНЫХ ЧАСТИЦ СО СТРУКТУРОЙ «ЯДРО-ОБОЛОЧКА» НА ОСНОВЕ МАКРОПОРИСТОГО ВЫСОКОКРЕМНЕЗЕМНОГО СТЕКЛА И МАГНЕТИТА

Лопатина Е.С., Волкова А.В., Соловьева Е.В., Ермакова Л.Э.

Санкт-Петербургский государственный университет

Одним из перспективных направлений материаловедения является получение магнитных материалов на основе пористых силикатов. Такие композиты обладают рядом ценных свойств, среди которых можно отметить биосовместимость и возможность управления в постоянном магнитном поле. Магнитные материалы находят свое применение в медицине, каталитических и сорбционных процессах. Получение композитных частиц на матрице из диоксида кремния позволяет избежать агрегации магнитных наночастиц, и, следовательно, улучшить их функциональные свойства. В свете возможного применения получаемых композитов в качестве сорбентов для извлечения ионов тяжелых металлов из водных растворов изучаются их электрокинетические свойства, во многом определяющие их способность к сорбции.

В рамках работы получены порошки магнетита и его композитов на основе частиц макропористого высококремнеземного стекла с различным содержанием Fe_3O_4 (5 – 20 мас.%). Образование фазы магнетита подтверждено методами РФА, РФЭС и спектроскопии КРС. Вследствие гетероадагуляции частиц магнетита на поверхности пористых кремнеземных частиц получены композиты с различной степенью модифицирования внешней поверхности матрицы, что подтверждено методами СЭМ и ЭДС. В растворах индифферентного электролита (NaCl) положение изоэлектрической точки ($pH_{ИЭТ}$) и значения дзета-потенциала композитов совпадают, в растворах, содержащих специфически сорбирующийся ион никеля ($NiCl_2$), наблюдаются две изоэлектрические точки. Влияние содержания магнетита на электрокинетические свойства композитов возрастает по мере уменьшения влияния специфичности ионов никеля, а именно при удалении от положения $pH_{ИЭТ-2}$ в сторону меньших значений pH и уменьшении ионной силы растворов $NiCl_2$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (проект № 94031307). Исследования проведены с использованием оборудования Междисциплинарного Ресурсного центра Научного парка



СПбГУ по направлению «Нанотехнологии», Ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Оптическое и лазерные методы исследования вещества», «Физические методы исследования поверхности», «Рентгенодифракционные методы исследования».

ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ТЕЙЛОРА

Лукашов Р.В.¹, Волков. Г.А.^{1,2}, Остропико Е.С.¹, Груздков А.А.¹

¹Санкт-Петербургский государственный университет

²Институт проблем машиноведения РАН

Представлены результаты исследования, полученные при проведении ударных тестов Тейлора [1,2], реализуемых в рамках работы по определению динамических свойств материалов в Санкт-Петербургском государственном университете. Выделены основные технические задачи, определяющие корректность эксперимента, приведены способы их решения, реализованные в узлах установки.

Подробно описывается работа по отладке и усовершенствованию метода регистрации скорости пролета на малых расстояниях [3], для получения достоверных прямых измерений. Она включает в себя методику по синхронизации оптических приемников. Кратко описана методика измерения геометрических размеров образцов. Дополнительно обсуждается возможная модификация метода для получения новых прямых измерений и предложены варианты их использования и интерпретации.

Работа выполнена при поддержке Мегагранта №075-15-2022-1114

Литература

1. Taylor, G.I.; The testing of materials at high rates of loading, J. Inst. Civil Engrs 26:486-519, 1946.
2. Taylor, G.I.; The use of flat ended projectiles for determining yield stress. 1: Theoretical considerations, Proc. of the R. Soc. Lond. A, 194:289- 299; 1948.
3. Златин Н.А., Красильщиков А.П., Мишин Г.И., Попов Н.Н. Баллистические установки и их применение в экспериментальных установках // СПб.: Наука – 1974

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ИЗМЕНЕНИЯ ПРОЧНОСТИ ПОЛИМЕРОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ СВЕТА СОЛНЕЧНОГО ДИАПАЗОНА

Орехов А.В., Павилайнен Г.В.

Санкт-Петербургский государственный университет

Явление фотодеградации полимеров связано с их облучением светом солнечного диапазона. Оно вызывает изменения различных свойств полимеров: обесцвечивание, увеличение шероховатости поверхности, охрупчивание материала, снижение прочности при долговременной экспозиции [1,2]. Описанные изменения характерны как для чистых



полимеров (без примесей), так и для полимерных композитов, в том числе и с добавлением фотоактивных наночастиц: диоксида титана (TiO_2), титанатов (BaTiO_3 , SrTiO_3), оксида цинка (ZnO) и др. Нанокompозиты включающие фотокатализаторы представляют большой интерес для теоретического исследования и практического применения. Введение в объём или на поверхность полимера этих наночастиц позволяет изменять его оптические, электрофизические и механические свойства.

Из работ Рэнби, Рабека [1] и Эгертона [3] можно сделать вывод, что ответственными за разрушение полимеров под воздействием солнечного света являются поверхностные реакции, в частности, с водой и кислородом. Рассматриваются три модели изменения прочности полимеров под воздействием света солнечного диапазона. Первая модель описывает монотонное снижение прочности полимеров без примесей. Вторая — монотонное снижение прочности композитных полимеров с наночастицами фотокатализатора [4]. Третья модель предназначена для аппроксимации изменения прочности полимеров с кратковременным упрочнением в начале экспозиции.

Список литературы

1. Рэнби Б., Рабек Я. Фотодеструкция, фотоокисление, фотостабилизация полимеров. Перевод с англ. В.Б. Иванова, под ред. Н.М.Эмануэля. М.: Мир, 1978. 676 с.
2. Эмануэль НМ., Бучаченко А. Л. Химическая физика молекулярного разрушения и стабилизации полимеров. М.: Наука, 1988. 388 с.
3. Egerton G. S. Photosensitizing properties of dyes and white pigments // Nature. 1964. Vol. 204. P. 1153–1155 <https://doi.org/10.1038/2041153a0>
4. Orekhov A. V., Artemev Y. M., Pavilaynen G. V. The Mathematical Simulation for the Photocatalytic Fatigue of Polymer Nanocomposites Using the Monte Carlo Methods // Mathematics. 2022, 10(9), 1613; <https://doi.org/10.3390/math10091613>

МЕХАНИКА ВЫСОКОПРОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Полянский В.А.

Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН)

Создание технологий увеличения предельных параметров материалов всегда являлось одной из главных целей материаловедения. И в этом направлении достигнуты значительные успехи. Значительный вклад внесли исследования последних десятилетий, развитие технологий создания внутренней микро, нано структуры и нанокompозитов.

Вместе с тем, накопились и проблемы, которые не позволяют в полной мере использовать новые материалы. Часть проблем связана с традиционной механикой деформируемого твердого тела, которая лежит в основе всех современных методов проектирования и расчета любых конструкций. В ее базовые уравнения входит уравнение сплошности материала, на основании которого делается замена материальных производных на пространственные и совершается еще целый ряд преобразований. В реальном материале все время образуются и самоуничтожаются различные микроструктурные и наноструктурные элементы: поры, трещины, вакансионные и дислокационные структуры, которые принципиально, но незначительно нарушают гипотезу сплошности.



В случае, когда материал не имеет предельных параметров, эти незначительные нарушения не приводят к существенным отклонениям от «сплошной модели». В том числе и потому, что локальные пластические деформации приводят к релаксации индуцированных этими дефектами механических напряжений. В случае высокопрочных материалов, удельные нагрузки на материал, предусмотренные конструкторами, кратно увеличиваются, а пластичность наоборот - неизбежно уменьшается. Материалу оказывается недостаточно обычных механизмов релаксации малых «неидеальностей» и конструкция начинает разрушаться, что происходит, несмотря на выполнение стандартных, успешно применяющихся последние сто лет, критериев прочности.

Результаты наших исследований показывают, что в основе сильного влияния водорода и коррозионной среды на новые материалы также лежит их способность выдерживать высокие удельные нагрузки.

Для каждого нового материала, проблема взаимосвязи его экстремальных параметров со всеми остальными требует отдельного исследования. Вместе с тем, базовые модели механики требуют пересмотра, а для проектирования конструкций из новых материалов необходимо разработать специальные методы расчета на прочность, построенные на новых моделях сплошной среды.

В докладе приводятся примеры механического описания феноменов, связанных с потерей сплошности, на основе моделей неклассических сплошных сред.

ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ЯВЛЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕНЕРАТИВНОГО ПОДХОДА И МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Редьков А.В.

Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН)

Несмотря на появление мощных инструментов [1] для *ab initio* поиска и предсказания кристаллической структуры новых перспективных материалов с необходимыми свойствами, проблема их внедрения в промышленность остается крайне актуальной. Она обусловлена сложностью разработки технологии синтеза, поскольку зачастую необходимо экспериментальное определение оптимальных условий для достижения требуемой однородности кристалла, его дефектности и чистоты от примесей, без которых невозможны практические применения. Глубокое теоретическое понимание процессов роста кристалла существенно упрощает оптимизацию синтеза [2, 3]. Однако, теория не может учесть ситуации, в которых одновременно реализуются несколько различных ростовых режимов и поверхностных явлений, таких как, например, нуклеация островков при наличии неустойчивостей, что часто имеет место в процессе синтеза. В связи с этим требуются фундаментально новые инструменты, которые позволят сократить время и усилия для анализа и оптимизации роста без использования дорогих реальных экспериментов. В настоящей работе представлен новый генеративный подход к описанию роста кристаллов на примере эпитаксии из газовой фазы. В нем используются высокопроизводительные параллельные вычисления и атомистические методы для генерации большого объема данных о процессе эпитаксии при различных условиях роста, включая: итоговую морфологию, режим роста, скорость роста, шероховатость, и другие свойства поверхности. Затем полученный массив данных анализируется с использованием методов машинного



обучения. Подход апробирован на кубическом кристалле Косселя и продемонстрированы его преимущества. Впервые создана цифровая ML-библиотека ростовых режимов, которая может быть использована при конечно-элементной оптимизации ростового реактора с учетом всех микроскопических явлений и режимов на поверхности растущего кристалла, и по сравнению с классическими подходами позволяет ускорить вычисления до 8000-10000 раз.

Литература:

- [1] Oganov, A. R., Glass, C. W. (2006), 124(24), 244704.
- [2] Dubrovskii, V. G. (2014). Nucleation theory and growth of nanostructures (p. 601). Berlin: Springer.
- [3] Redkov, A. V., Kukushkin, S. A. (2020). Crystal Growth & Design, 20(4), 2590-2601.

ФОТОИНДУЦИРОВАННОЕ ИЗМЕНЕНИЕ ГИДРОФИЛЬНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ

Рудакова А.В.

Санкт-Петербургский государственный университет

Доклад посвящен обзору научных данных по исследованию явления фотоиндуцированного изменения гидрофильности поверхности тонких пленок оксидов металлов, лежащего в основе способности фотоактивных материалов к самоочищению. Кратко и в популярной форме представлен материал по исследованию явления с момента открытия в 1997 году эффекта фотоиндуцированной супергидрофильности диоксида титана до настоящего времени, а именно изложена суть явления, описаны предлагаемые механизмы, приведены примеры влияния различных факторов на кинетику и термодинамику данного фотопроцесса.

Предлагаемый автором механизм рассматриваемого фотопроцесса основан на фотоактивации и фотодезактивации активных поверхностных центров, ответственных за последующую реструктуризацию адсорбированных молекул воды в полислоном гидроксильно-гидратном покрове на поверхности. Предполагается, что именно это приводит к изменению свободной поверхностной энергии и, как следствие, к изменению гидрофильности поверхности.

В заключение рассмотрены возможные пути управления смачиваемостью поверхности фотоактивных материалов с помощью света, среди которых особо отмечены создание гетероструктурных покрытий и модифицирование материала путем допирования.

Исследование проведено при финансовой поддержке гранта РФФ № 23-22-00161. Автор благодарит Научный парк и Лабораторию “Фотоактивные нанокompозитные материалы” при Санкт-Петербургском государственном университете за помощь в проведении синтеза и исследовании материалов.



СОЗДАНИЕ МАТЕРИАЛОВ БИМЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР: СЛОЖНОСТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Семёнов К.Н., Кукалия О.Н., Агеев С.В., Шаройко В.В.

*Первый Санкт-Петербургский государственный
медицинский университет им. акад. И.П. Павлова*

Говоря о материалах биомедицинского назначения, мы входим в область биомедицинского материаловедения. Это мультидисциплинарная область, которая формируется в результате конвергенции биологии и медицины, химии и искусственного интеллекта. Данный раздел науки связан с созданием материалов биомедицинского назначения с заранее заданными свойствами, а также с изучением и целенаправленным изменением свойств существующих материалов и установлением связи между составом, строением и свойствами материалов, т. е. решением классической триады.

В докладе будут представлены основные научные результаты, полученные в лаборатории биомедицинского материаловедения Первого Санкт-Петербургского государственного медицинского университета им. акад. И. П. Павлова: данные по синтезу и функционализации углеродных наноструктур (фуллерены, графены, нанотрубки, наноалмазы), созданию наночастиц противоопухолевых препаратов (липосомы, альбумин и аэросил), а также их конъюгатов с векторами для адресной доставки (фолиевая кислота, антитела).

Отдельное внимание будет уделено результатам, полученным совместно с кафедрой химии твёрдого тела Института химии СПбГУ по расчётам динамических и структурных характеристик углеродных наноматериалов методом молекулярной динамики на основе *ab initio* и классического подходов. Указанные исследования позволяют описывать процессы адресной доставки потенциальных лекарственных препаратов в клетку, определять оптимальные центры связывания препарата и носителя, устанавливать механизмы взаимодействия материалов с биологическими жидкостями и изучать процессы переноса или распределение заряда в биологических системах.

*Работа выполнена при поддержке Министерства здравоохранения РФ.
Наименование проекта: «Разработка молекулярного дизайна и создание препаратов на основе конъюгатов углеродных наноструктур, векторов адресной доставки и цитотоксических агентов для инактивации стволовых опухолевых клеток и компонентов микроокружения опухоли», ЕГИСУ: 123021300231-8.*

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВИБРОПОГРУЖЕНИЯ СВАЙ ВИБРООБЪЕМНЫМ МЕТОДОМ

Сизиков В.С.

Санкт-Петербургский государственный архитектурно-строительный университет

Одним из наиболее эффективных методов погружения свай в водонасыщенные грунты является вибрационный метод, позволяющий существенно снизить силы сопротивления погружению, возникающие на боковой и лобовой поверхностях свай. Факторами, ограничивающими применение этого метода для погружения железобетонных свай,



являются разрушение оголовка и из-за точечного действия циклической нагрузки и низкая скорость погружения [1]. Для решения этой проблемы предлагается виброобъемный метод погружения, основанный на изменении точки приложения вибрационной нагрузки. Метод заключается в периодическом двухстороннем захвате сваи по боковым поверхностям двумя плоскими рабочими органами, осуществляющими вдавливание с последующим отходом органов от сваи с перестановкой на новую точку контакта со сваем для начала следующего цикла погружения. Ставится задача определения скорости вибропогружения элементов при различных параметрах вибрационной нагрузки и характеристиках контактного взаимодействия рабочих органов с погружаемым элементом.

Для решения поставленной задачи выполнено моделирование процесса погружения железобетонной сваи С80.35 сечением 35x35 см и длиной 8 м в водонасыщенный песчаный грунт. Для моделирования процесса использована чистопластическая модель грунта [2]. В качестве критерия эффективности процесса принята средняя скорость установившегося режима вибропогружения. Выполнено сравнение двух методов вибропогружения: погружение простейшим вибропогружателем, закрепляемым на оголовке сваи, при продольных колебаниях и погружение виброобъемным методом. Исследование методов выполнено для одинаковых значений суммарного момента дебалансов вибровозбудителей 60 кг·м при частоте вынуждающей силы 12 Гц.

В результате моделирования получены зависимости скорости погружения виброобъемным методом в зависимости от величины момента дебалансов вибровозбудителей и суммарного статического зазора между поверхностями сваи и рабочих органов. Определены значения зазора, обеспечивающего оптимальные режимы процесса с наибольшей скоростью вибропогружения. В результате сравнения двух методов выявлено, что виброобъемный метод погружения на оптимальных режимах более эффективен по сравнению с обычным вибропогружением с продольными колебаниями. Полученные зависимости и значения оптимальных характеристик процесса вибропогружения могут быть использованы для разработки рекомендаций к выбору параметров конструкции и режимов работы виброобъемного погружателя.

Литература

[1] Новожилов Г.Ф. Бездефектное погружение свай в талых и вечномёрзлых грунтах. Л.: Стройиздат, Ленингр. отд-ние, 1987. - 109 с.

[2] Цейтлин М. Г., Верстов В. В., Азбель Г. Г. Вибрационная техника и технология в свайных и буровых работах. Л.: Стройиздат, Ленингр. отд-ние, 1987. - 262 с.

СТРУКТУРА И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА СТЁКОЛ СИСТЕМЫ GES2 – GA2S3 – SB2S3:PR3+

Смирнов Е.В., Шахбазова Х.Я., Тверьянович А.С.

Санкт-Петербургский государственный университет

Халькогенидные стёкла, допированные редкоземельными ионами, интересны как активные люминесцентные среды ИК диапазона - особенно для разработки оптических волокон, а также в качестве материалов для различных оптических сенсоров. Были исследованы закономерности, связывающие структурно-химическое строение матрицы халькогенидного стекла с однородностью распределения в ней РЗИ на примере псевдотройной системы Ga₂S₃-GeS₂-Sb₂S₃ (рис. 1).



Согласно расчетам по теории Джадда-Офельта в стеклах с большим содержанием Sb_2S_3 должна наблюдаться наибольшая эффективность люминесценции ионов Pr^{3+} . Чего не происходит, в связи с увеличением эффекта концентрационного тушения при росте содержания Sb_2S_3 в стёклах (рис. 2). Введение в стекла Pr приводит к существенному увеличению доли связей Sb-Sb, Sb-Ge, Ge-Ge в стеклах, обогащенных Sb_2S_3 и GeS_2 . В случае стёкол, обогащенных Ga_2S_3 , такой эффект не наблюдается, по-видимому, из-за того, что Ga способствует образованию трех-координированных атомов серы.

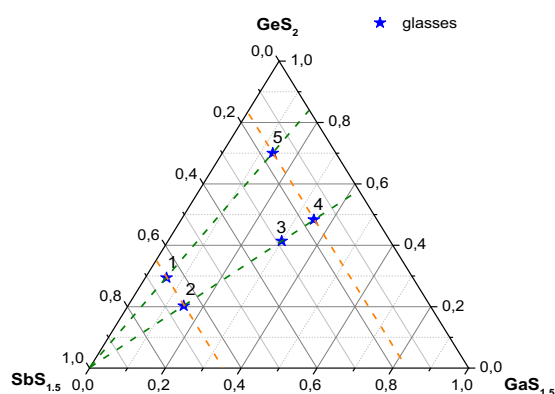


Рис.1. Исследованные составы (звездочки, номера) и разрезы, которым они принадлежат (пунктирные линии) на тройной диаграмме GeS_2 – $\text{GaS}_{1,5}$ – $\text{SbS}_{1,5}$.

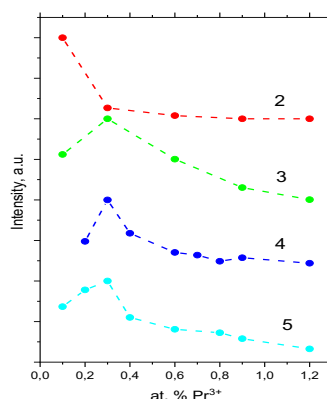


Рис. 2. Зависимость интенсивности люминесценции на длине волны 1040 нм от концентрации ионов Pr^{3+} для исследованных стекол (точки с пунктирной линией).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00074, <https://rscf.ru/project/22-23-00074>.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ ВИБРОЗАЩИТНОГО УСТРОЙСТВА ИЗ СПЛАВА С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ С УЧЕТОМ ТЕПЛООБМЕНА

Стародубова М.С., Беляев Ф.С., Волков А.Е., Евард М.Е.

Санкт-Петербургский государственный университет

Сплавы с памятью формы (СПФ) относятся к функциональным материалам, свойства которых меняются в зависимости от внешних условий (температуры, предварительной нагрузки и др.). Применение этих сплавов в производстве демпферов позволяет добиться лучшей устойчивости конструкций и уменьшения амплитуды колебаний. При виброзащите с помощью деталей из СПФ температура играет особую роль, поскольку ее изменение влияет на механические характеристики сплава.

Ранее было проведено экспериментальное и теоретическое исследование колебаний крутильного маятника из СПФ. Было показано, что колебаниями можно управлять путем подачи на активный элемент тепловых импульсов в определенные моменты времени. Однако вопрос о влиянии условий теплообмена с окружающей средой в модели не был рассмотрен.



В данной работе исследовались свободные колебания устройства, представляющего из себя крутильный маятник с элементом из сплава с памятью формы, с одного края жестко закрепленный, с другого соединенный с упругим стержнем. Получены диаграммы колебаний для разных условий теплообмена и с учетом выделения и поглощения тепла при прямом и обратном мартенситном превращении. Показано, что скорость предварительной нагрузки и условий теплообмена значительно влияет на затухание колебаний для температур, близких к температуре начала мартенситного превращения. В отличие от маятника без упругого элемента, у маятника с упругим элементом затухание колебаний происходит медленнее, поэтому теплообмен с окружающей средой оказывает большее влияние даже при небольших значениях коэффициента теплообмена.

Полученные результаты могут представлять интерес при разработке реальных виброзащитных устройств на основе сплавов с памятью формы.

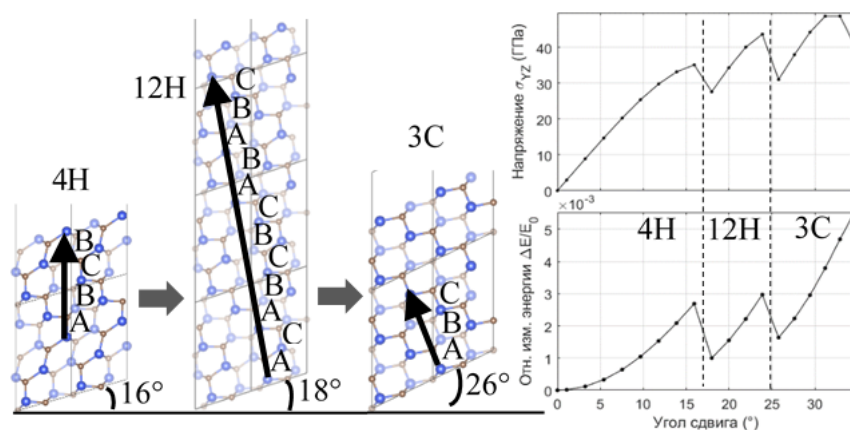
Работа выполнена при поддержке РФФ (проект 23-21-00167).

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ И СИМВОЛЬНЫЙ РАСЧЁТ КОНСТАНТ НЕЛИНЕЙНОЙ УПРУГОСТИ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА И СТРУКТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПРИ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЯХ ПОЛИТИПОВ ИДЕАЛЬНЫХ АЛМАЗОПОДОБНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Телятник Р. С.

Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН)

Большие упругие деформации имеются в окрестности дефектов кристаллической решётки и в псевдоморфных слоях гетероструктур, например, плёнки карбида кремния, растянутой на 25% подложкой кремния при когерентной состыковке решёток, а адекватная аппроксимация энергии упругости таких кристаллов структуры алмаза (C, Si, SiC, AlN, GaN и др.) до их разрушения или структурного превращения в другой политип требует около 5 порядков разложения по малым деформациям, что далеко за пределами начального порядка в форме гармонического приближения пружинками Гука, соответствующего линейной зависимости напряжения, поэтому энергия здесь рассчитывается средствами вычислительной квантовой химии (пакет ABINIT, метод функционала электронной плотности DFT GGA, а эффект невалентных электронов описывается эффективным потенциалом, как в классической химии) для различных комплексных деформаций при 0°K, позволяющих определить полный набор независимых коэффициентов упругости, суммарное число которых зависит от симметрии (11 кристаллических классов Лауэ) и для изотропного/алмазно-





кубического/анизотропного случаев растёт, соответственно, от $2/3/21$ в гармоническом порядке до $5/9/77$, $9/20/203$, $14/38/455$, $21/70/917$,... с каждым следующим порядком. Чтобы определить независимые компоненты, средствами компьютерной алгебры (символьный пакет в Octave) решалась вспомогательная задача усреднения анизотропного материала до соответствующей симметрии, что обобщает усреднение констант по Фогту не только на нелинейную упругость, но и на симметрии помимо изотропной, что может пригодиться для описания текстурированных поликристаллов. Из кривых напряжения Коши от осевых и сдвиговых деформаций идеального кристалла в разных направлениях можно эвристически оценить и характер пластической анизотропии неидеального кристалла (оценённые параметры Хилла дали верные значения твёрдости при конечно-элементном моделировании индентирования). Рисунки демонстрируют сдвиг карбида кремния с переходом гексагонального политапа “4Н” (4 слоя составляют период вдоль оси симметрии) в “12Н” с переориентацией оси и далее в алмазно-кубический “3С”.

МАЯТНИК КАПИЦЫ – АКТУАЛЬНАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ЗАДАЧА

Товстик Т.П.

Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН)

Колебательные явления – одно из фундаментальных явлений природы. Введение колебаний в систему меняет её поведение, как количественно, так и качественно. Известно, что жидкость под влиянием вибраций кипит при другой температуре, песочные часы могут в разы замедлять свой ход, а устойчивое положение равновесия висящего вниз маятника может стать неустойчивым, в то время как верхнее положение маятника – стать устойчивым. Задача о колебании маятника около верхнего положения равновесия получила название задачи Капицы.

Первые опыты по стабилизации перевёрнутого маятника описаны в работах А. Стефенсона в 1908 году. С началом освоения физики высоких энергий, этот вибрационный эффект начал использоваться для преодоления энергетических барьеров в задачах физики. Уравнениям, описывающим движение маятника Капицы, подчиняются элементы систем в различных наукоёмких технологиях. Число исследований и публикаций по применению эффекта Капицы постоянно растёт, что приводит к появлению новых изобретений в области вибрационной техники и технологии.

В докладе представлены наглядные интерпретации, описывающие и объясняющие парадоксальное поведение перевёрнутого маятника. Приводится уравнение движения маятника для малых отклонений от вертикали – уравнение Матье и разбирается диаграмма устойчивости его решения.

Литература:

1. Капица П.Л. Маятник с вибрирующим подвесом // Успехи физических наук. 1951. Т. 44. № 1, С. 7–20.



УНИВЕРСАЛЬНАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ ВНУТРИКЛЕТОЧНОЙ ДИАГНОСТИКИ И ТЕРАПИИ НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ СТРУКТУР ПОРФИРИНА И ЗОЛОТЫХ НАНОЧАСТИЦ

Тыщенко А.А., Шмакова А.В.

(Научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. Поволоцкий А.В.)

Санкт-Петербургский государственный университет

В существующем разнообразии материалов актуальным предметом исследований являются соединения, обладающие многофункциональностью и стабильностью, которые необходимы для решения многих задач в области медицины. Целью настоящей работы является разработка и исследование биосовместимых гибридных наноструктур на основе конъюгатов N-гидроксисуцинимид тетрафенилпорфирина (NHS-TPP) и золотых наночастиц (ЗНЧ), покрытых полимерной оболочкой поли(алиламин) гидрохлорида (РАН). Данные соединения потенциально могут быть использованы в различных методах обнаружения и лечения раковых заболеваний, а также в области термометрии.

Для синтеза гибридных структур использовались золотые наночастицы, полученные методом лазерной абляции золотой мишени в воде. Конъюгаты синтезировались в 2 этапа: покрытие ЗНЧ полимерной оболочкой РАН и ковалентная конъюгация порфирина NHS-TPP к полимерной оболочке. Ковалентная пришивка порфирина проходила путём добавления NHS-TPP к раствору ЗНЧ с полимером при контроле рН. Формирование гибридных наноструктур и их стабильность подтверждались методом просвечивающей электронной микроскопии.

Проведена оценка структур в качестве соединений для фотодинамической терапии с помощью исследования выработки синглетного кислорода полученными конъюгатами. Биосовместимость гибридных наноструктур проверялась посредством теста на цитотоксичность. Люминесценция полученных образцов наблюдалась с помощью конфокального сканирующего люминесцентного микроскопа. Для оценки возможности использования данных гибридных наноструктур в термометрии проведены исследования зависимостей интенсивности люминесценции от температуры.

Синтезированные наноструктуры демонстрируют эффективность генерации синглетного кислорода, что даёт возможность использования данных конъюгатов в области фотодинамической терапии. Монотонность изменения интенсивности при варьировании температуры показывает возможность использования полученных гибридных соединений в области люминесцентной термометрии. Размер полученных наноструктур и отсутствие цитотоксичности позволяет использовать данные конъюгаты во внутриклеточных исследованиях. Многофункциональность исследуемых гибридов демонстрирует перспективность использования данных наноструктур в области медицины.



НЕЛИНЕЙНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ПУАССОНА ОТ ИСТИННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ ПРИ УПРУГОМ ОДНОРОДНОМ РАСТЯЖЕНИИ

Ульянов А.А., Третьяков Д.А.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ)

Работа направлена на исследование упругих характеристик изотропного твердого тела в условиях одноосного однородного растяжения в упругой области. Получена нелинейная зависимость коэффициента Пуассона от истинных деформаций. Данная зависимость была экстраполирована на такие механические и термодинамические параметры материала как константы Ламе и параметр Грюнейзена. В качестве характеристики деформированного состояния использовался квадрат отношения продольной и поперечной скоростей упругих волн. Построена математическая модель прогнозирования величины упругой деформации на основании текущих значений параметров материала, в основе которой лежит акустоупругий эффект.

ПОСТАНОВКА И РЕШЕНИЕ СВЯЗАННЫХ ЗАДАЧ ХЕМОМЕХАНИКИ

Фрейдин А.Б.

Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН)

Взаимосвязи между химическими превращениями, напряженно-деформированным состоянием и разрушением находятся на стыке фундаментальной науки и инженерных приложений. Особую актуальность установление этих взаимосвязей имеет в связи с прогнозированием времени жизни микроразмерных элементов конструкций микросистемной техники (МЭМС) в условиях термомеханических и химических воздействий, с технологией полупроводников, с использованием бессвинцовых припоев, с разработкой оптимальных анодов литий-ионных батарей,

В докладе рассмотрены химические реакции между деформируемым твердым и диффундирующим компонентами. Реакция сопровождается собственной деформацией превращения и изменением реологических свойств материала. К реакциям такого типа относятся, в частности, окисление и литизация кремния.

Развит подход к описанию химических реакций в деформируемом теле, основанный на концепции тензора химического сродства. Показано, что механические напряжения влияют на кинетику распространения фронта реакции через нормальную компоненту тензора сродства. Обсуждается постановка связанных начально-краевых задач «диффузия – химия – механика». Эффективность подхода продемонстрирована на примерах решения краевых задач. Показано, что механические напряжения могут замедлять, блокировать, а также запускать химические реакции.

Развиты процедуры анализа устойчивости фронта реакции и исследована конкуренция глобальной кинетики фронта и кинетики роста возмущений. Показано, что потеря устойчивости фронта может быть причиной разрушения. Обсуждаются результаты численных экспериментов, мотивированных теорией и инженерными приложениями.



РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТРЕЩИНЫ КАК ПРОЦЕСС ИЗМЕНЕНИЯ КОНФИГУРАЦИИ ТЕЛА

Фролов М.М., Савиковский А.В., Семёнов А.С.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Доклад посвящен рассмотрению одного из фундаментальных подходов в механике разрушения – описанию движения трещины как изменения отсчетной конфигурации тела [1]. Исследуется методология построения общей теории движения трещины в терминах механики конфигурационных сил и введение фундаментальных понятий: трещиннодвижущей силы и сил сопротивления распространению трещины. Отмечается связь введенных понятий с «классическими» категориями механики разрушения – выделением энергии и J интегралом. Обсуждаются перспективы применения механики конфигурационных сил к описанию разрушения изотропных и анизотропных упругих тел.

Литература:

1. Gurtin M.E., Podio-Guidugli P. Configurational forces and a constitutive theory for crack propagation that allows for kinking and curving // Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1998, Vol. 46, №8, pp.1343-1378.

РЕГУЛЯРНОЕ И МАХОВСКОЕ ОТРАЖЕНИЕ СКАЧКОВ УПЛОТНЕНИЯ: ИСТОРИЧЕСКИЙ ОБЗОР И СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ

Чернышов М.В., Савелова К.Э.

*Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ»
им. Д.Ф. Устинова*

Как известно со времён Эрнста Маха и его сотрудников, отражение скачков уплотнения (неподвижных ударных волн) от поверхности, плоскости или оси симметрии может происходить одним из двух способов:

- регулярное отражение, при котором формируется ударно-волновая структура, состоящая из падающего и отраженного скачков, с общей точкой на отражающей поверхности;

- маховское отражение, при котором образуется более сложная тройная конфигурация, состоящая из трёх скачков (падающего, отраженного и главного, или маховского), имеющих общую (тройную) точку на определенной высоте от отражающей поверхности, и тангенциального разрыва за ней, разделяющего два потока с сильно различающимися скоростями и термодинамическими параметрами газа.

Определение вида отражения скачков уплотнения и свойств возникающих газодинамических разрывов важно для проектирования сверхзвуковых воздухозаборников, авиационных и ракетных двигателей, решения задач тепловой защиты, взрывозащиты и взрывоподавления.

Общепризнаны два критерия смены типа отражения скачков уплотнения и ударных волн, введенные фон Нейманом [1]: «критерий механического равновесия», он же критерий фон Неймана, и «критерий полного угла поворота потока» (detachment criterion). При их



сравнении обнаруживается, что существует достаточно широкая область параметров течения и свойств падающих скачков, внутри которой могут теоретически реализовываться оба вида отражения. Согласно критерию фон Неймана, отражение в этой области маховское, по другому критерию – регулярное.

Исследования, на разных этапах систематизированные в работах [2-5], привели к выводу, что в установившихся сверхзвуковых течениях газа выполняется «критерий механического равновесия» фон Неймана (в отличие от нестационарных задач отражения ударных и взрывных волн, где справедливым полагался detachment criterion). Отклонения от критерия фон Неймана списывались на физико-химические эффекты реального газа, а предсказанные в работе [6] гистерезисные явления считались, скорее, фантазией авторитетных авторов. В программной работе [7] актуальными проблемами объявлялись, прежде всего, поиск моделей для определения высоты тройной точки и решение задачи о взаимодействии падающего скачка уплотнения с пограничным слоем. В представленном докладе, в частности, рассказывается о совершенствовании модели ударно-волновой структуры маховского отражения, в том числе при наличии импульсного энергоподвода [8], и возможности современного применения таких моделей для перспективных реактивных двигателей смешанного типа действия [9].

Бурное развитие вычислительной техники, происходившее в 1990-х годах, стимулировало численное моделирование отражения скачков уплотнения, анализ смены вида возникающих ударно-волновых структур и связанных с этим гистерезисных явлений. Существование гистерезиса («запаздывания» перехода от регулярного отражения к маховскому по сравнению с обратным переходом) было подтверждено численно (как методами вычислительной механики сплошной среды, так и прямым статистическим моделированием Монте-Карло), а также показано экспериментально (несмотря на определенные вопросы к чистоте эксперимента). Предлагались новые критерии смены типа отражения, основанные как на элементарных соображениях об устойчивости течения, так и на выборочном применении законов термодинамики (например, с помощью принципа минимума производства энтропии, известного как «теорема Пригожина»). Обоснованность применения термодинамических критериев, предназначенных для анализа устойчивости неравновесных систем к малым возмущениям, вызвала бурную дискуссию между ведущими специалистами в области взаимодействия газодинамических разрывов (Л.Ф. Хендерсон, Х. Хорнунг, Г. Бен-Дор, М.С. Иванов, В.Н. Усков и многие другие). Дискуссия о дуализме отражения и сопутствующих гистерезисных явлениях продолжается и в наши дни.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-20269, <https://rscf.ru/project/22-29-20269/>.

Литература

1. von Neumann J. Oblique reflection of shock waves // Collected Works. London: Pergamon Press, 1963. Vol. 6. Pp. 238-299.
2. Гриффитс У. Ударные волны // Современная гидродинамика. Успехи и проблемы. М.: Мир, 1984. С.120-146.
3. Hornung H.G. Regular and Mach reflection of shock waves // Annual Review of Fluid Mechanics. 1986. Vol.18. Pp. 33-58.
4. Адрианов А.Л., Старых А.Л., Усков В.Н. Интерференция стационарных газодинамических разрывов. Новосибирск: Наука, 1995. 180 с.



5. Ben-Dor G. Shock Wave Reflection Phenomena. Berlin – Heidelberg – NewYork: Springer, 2007. 342 p.
6. Hornung H.G., Oertel H., Sandeman R.J. Transition to Mach reflexion of shock waves in steady and pseudosteady flow with and without relaxation //Journal of Fluid Mechanics. 1979. Vol. 90. Part 3. Pp. 541-560.
7. Ben-Dor G., Takayama K. The phenomena of shock wave reflection – a review of unsolved problems and future research needs // Shock Waves. 1992. Vol. 2. Pp. 211-223.
8. Chernyshov M.V., Savelova K.E. An Approximate Analytical Model of a Jet Flow with Mach Reflection and Pulsed Energy Supply at the Main Shock // Fluids. 2023. Vol. 8. Issue 4. Paper No. 132. 16 p.
9. Chernyshov M.V., Murzina (Savelova) K.E., Matveev S.A., Yakovlev V.V. Shock-wave structures of prospective combined ramjet engine // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2019. Vol. 618. Paper No. 012068. 10 pp.

АГРЕГАТИВНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ПОЛИДИСПЕРСНОГО ГИДРОЗОЛЯ ПОЛОЖИТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННОГО ДЕТОНАЦИОННОГО НАНОАЛМАЗА

Чуйков Н.С., Ермакова Л.Э., Волкова А.В.

Санкт-Петербургский государственный университет

Необходимость создания новых методов медицинской диагностики и доставки лекарственных препаратов в организме человека приводит к необходимости поиска материалов, обладающих высокой биосовместимостью и низкой цитотоксичностью. Перспективным для таких целей материалом является детонационный наноалмаз (ДНА). Для полноценной реализации систем доставки на основе ДНА необходимо комплексное изучение устойчивости его золей в растворах электролитов при различных значениях ионной силы и pH.

В связи с этим в докладе представлены результаты исследования коагуляции исходно седиментационно и агрегативно устойчивого полидисперсного водного золя положительно заряженного детонационного алмаза (порошок ДНА был получен путём подрыва смеси тротила и гексогена) с частичной концентрацией $(2.44 \pm 0.19) \times 10^{10}$ частиц/см³ в зависимости от концентрации и pH растворов индифферентного электролита (NaCl). Установлено, что изоэлектрическая точка в 10^{-3} М растворе NaCl лежит при pH 7. Определены пороги медленной и быстрой коагуляции при естественном pH_{ест} 5.8, составившие 2.5×10^{-3} М и 7.5×10^{-3} М, соответственно. Показано, что для исследованного гидрозоля ДНА характерна весьма узкая область медленной коагуляции, и значение порога быстрой коагуляции заметно ниже, чем для типичных ионно-стабилизированных коллоидов. Коагуляция гидрозолей ДНА обусловлена, главным образом, уменьшением вклада ионно-электростатической составляющей энергии парного взаимодействия частиц при уменьшении абсолютной величины дзета-потенциала. Следует отметить, что при достаточно высоких концентрациях растворов хлорида натрия ($\geq 3 \times 10^{-2}$ М) и pH > pH_{ест} вклад в устойчивость дисперсий наноалмаза, по-видимому, также вносит наличие граничных слоев воды у поверхности частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда, проект № 23-23-00333. Исследования проведены с использованием оборудования



Междисциплинарного Ресурсного центра Научного парка СПбГУ по направлению «Нанотехнологии», Ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Оптическое и лазерные методы исследования вещества», «Физические методы исследования поверхности», «Рентгенодифракционные методы исследования», «Методы анализа состава вещества».

МИНИМИЗАЦИЯ ГРАНИЧНОГО ТЕРМОСОПРОТИВЛЕНИЯ ДИСПЕРСНО-НАПОЛНЕННЫХ КОМПОЗИТОВ: МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ ПОДХОД

Шилько С.В.¹, Черноус Д.А.¹, Чжан Цян²

¹*Институт механики металлополимерных систем им. В.А. Белого НАН Беларуси,*

²*Харбинский политехнический университет*

Рассмотрена проблема пассивного терморегулирования в электронике и машиностроении с использованием дисперсно-наполненных композитов с высокой теплопроводностью. В частности, исследованы металлоуглеродные композиционные материалы, получаемые методом инфильтрации под давлением расплава алюминия в смесь микрочастиц алмаза. Рассматривается физический механизм нежелательного барьерного эффекта в виде высокого термосопротивления на границе раздела «матрица – наполнитель» и методы материаловедения, позволяющие сформировать наноразмерный межфазный слой, обеспечивающий более свободное прохождение фононов.

Получены композиты, в которых алмазные частицы плакированы вольфрамом W и карбидом вольфрама WC [1]. Установлено, что нанесение указанных покрытий ингибирует образование карбида алюминия Al_4C_3 вследствие формирования Al_5W , в то время как образование аморфного углерода в композитах с покрытием из карбида вольфрама WC вызывает ослабление межфазного взаимодействия и большое различие в акустическом импедансе с алмазом, что приводит к снижению теплопроводности.

Для оптимизации состава композита и параметров межфазного слоя разработан аналитический метод расчета термомеханических характеристик дисперсно-наполненных композитов, основанный на структурной модели Такаянаги, гипотезах составного включения и эквивалентной матрицы. Коэффициент теплопроводности определяется с учетом встречных тепловых потоков, анизотропии частиц наполнителя и других факторов, что позволило повысить точность прогнозирования по сравнению с альтернативными теориями (Хассельмана-Джонсона и дифференциальной эффективной среды). Тем самым показана эффективность междисциплинарного подхода (механика деформируемого твердого тела, физика конденсированного состояния, металлоорганическая химия) для решения задач материаловедения.

Исследование поддержано БРФФИ (T22КИ-032, T22КИТГ-003) и НФЕНК (проекты 52071117, 52111530297, 51771063).

Список использованных источников

1. Zhu, P. Effect of Interface Structure on Thermal Conductivity and Stability of Diamond/Aluminum Composites / P. Zhu, Q. Zhang, S. Qu, Z. Wang, H. Gou, S.V. Shil'ko, E. Kobayashi, and G. Wu // Composites Part A – 2022. – 162. – 107161. – 11 p. doi.org/10.1016/j.compositesa.2022.107161



МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗУПРОЧНЕНИЯ РАЗНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ УДАРНОМ НАГРУЖЕНИИ И ТЕМПЕРАТУРНО-ВРЕМЕННОЕ СООТВЕТСТВИЕ

Шисян Чжао, Петров Ю.В., Волков Г.А.

Санкт-Петербургский государственный университет

Термическое разупрочнение, связанное с релаксацией напряжений за счет повышения температуры после ударного нагружения, исследуется подходом инкубационного времени. Пластическая деформация материала при ударном нагружении часто сопровождается заметным адиабатическим повышением температуры. Феноменологические модели, описывающие такие термомеханические поведения металлов, обычно разрабатываются путем введения эмпирических компонентов, зависящих от скорости и температуры, в существующие классические основы, первоначально предложенные для квазистатических случаев. Целью данной работы является моделирование термического разупрочнения металлов при высокоскоростных нагрузках со использованием подхода инкубационного времени и исследование температурно-временного соответствия, то есть зависимости инкубационного времени от температуры, путем введения относительного напряжения в широком диапазоне деформации, скорости деформации и температуры. Подход инкубационного времени рассматривает скоростную чувствительность как проявление временной чувствительности материалов. Кроме этого, была разработана модификация релаксационной модели по пластичности (РП модель), и было показано, что данная модель может быть получена из временно зависимого уравнения поверхности текучести в рамках подхода инкубационного времени. На основе экспериментальных данных для стали HSLA-65 и композита на основе вольфрама 93W-4.9Ni-2.1Fe сравниваются описательные способности разработанной РП модели с другими популярными моделями (феноменологическими и физически основанными), а также с моделью искусственных нейронных сетей (ANN). Обсуждаются преимущества и недостатки различных моделей, и исследуются основные отличия между моделью ANN и другими моделями.

Работа выполнена при поддержке Мегагранта №075-15-2022-1114

ГЛУБОКИЕ ЭВТЕКТИЧЕСКИЕ РАСТВОРИТЕЛИ В МИКРОЭКСТРАКЦИОННЫХ МЕТОДАХ АНАЛИЗА

Шишов А.Ю.

Санкт-Петербургский государственный университет

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) представляют собой смесь двух и более компонентов, температура плавления которых значительно ниже температур плавления исходных материалов. Экологическая безопасность, простота приготовления в лаборатории и дешевизна ГЭР привели к тому, что в последнее время они находят все более широкое применение в аналитической химии. Наиболее широко ГЭР находят применение в



аналитической химии в микроэкстракционных методах выделения аналитов различной природы из разнообразных и сложных объектов анализе.

В докладе будут обсуждаться аналитические возможности и ограничения ГЭР в таких подходах к микроэкстракции, как классическая жидкостная микроэкстракция, капельная, дисперсионная, гомогенная, мембранная и другие виды микроэкстракции. В докладе также будут представлены последние тенденции в области автоматизации химического анализа с использованием глубоких эвтектических растворителей, а также проблемы и ограничения, связанные с использованием ГЭР в химическом анализе и основные перспективы развития этого направления.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ номер МК-806.2022.1.3. Научные исследования частично выполнялись в ресурсном центре «Методы анализа состава вещества» СПбГУ.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ ГЕМОСОРБЕНТЫ НА ОСНОВЕ АМОРФНОГО ДИОКСИДА КРЕМНИЯ: СИНТЕЗ И ГЕМОЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Юрьев Г. О.^{1,2,3}

(научный руководитель к. х. н., Постнов В.Н.)

¹ *Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет им. И. П. Павлова,*

² *Национальный медицинский исследовательский центр им. А. А. Алмазова*

³ *Российский научный центр радиологии и хирургических технологий имени академика А. М. Гранова*

Введение. В клинической практике осуществляется процедура под названием малообъемная гемоперфузия (МОГ), суть которой основана на контактном взаимодействии крови с гемосорбентом. Она применяется при лечении пациентов с тяжелыми отравлениями и патологиями конечностей (гангрена, поражения, полученные при ожогах или обморожении). При выборе гемосорбента необходимо учитывать ряд требований: он должны быть механически устойчивыми, нетоксичными, био- и гемосовместимыми, а также селективно сорбировать определенные вещества из кровотока. Актуальной задачей является синтез и исследование свойств сорбентов, которые могут быть использованы в качестве гемоконтактных материалов. В данной работе представлены данные о синтезе гемосорбентов на основе аморфного диоксида кремния (силохромы, модифицированных углеродными наноструктурами и исследования их гемосовместимости.

Цель. Синтез и исследование гемосовместимости композитов на основе силохрома, модифицированных пироуглеродным слоем и пироуглеродным слоем с фуллереном C₆₀.

Материалы и методы. Для осуществления синтеза были использованы: аморфный диоксид кремния силохром, пропаргиловый спирт, азот и фуллерен C₆₀. Установка для нанесения пироуглеродного слоя, а также спектрофотометр Thermo Scientific Evolution 300.

Результаты. Были синтезированы композиты на основе силохрома, модифицированные пироуглеродным слоем и пироуглеродным слоем с фуллереном C₆₀, а также исследована их гемосовместимость. Гемолитическую активность сорбентов оценивали по изменению оптической плотности в пробах плазмы крови до и после контакта с сорбентом.



Выводы. Исследования синтезированных композитов показали, что композит на основе диоксида кремния, модифицированный пироуглеродом и фуллереном C_{60} является гемосовместимым. Сорбент при контакте с кровью практически не вызывал гемолиза в течение часа, в отличие от силохрома, модифицированного пироуглеродом. Таким образом, был синтезирован сорбент, который в процессе гемосорбции не подвергался десорбции модификатора и обладал хорошей гемосовместимостью.

Работа выполнена при поддержке Министерства здравоохранения РФ. Наименование проекта: «Разработка молекулярного дизайна и создание препаратов на основе конъюгатов углеродных наноструктур, векторов адресной доставки и цитотоксических агентов для инактивации стволовых опухолевых клеток и компонентов микроокружения опухоли», ЕГИСУ: 123021300231-8.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ КАТАЛИЗАТОРА МАТЕМАТИЧЕСКИМИ СРЕДСТВАМИ

Язовцева О.С.

Математический институт им. В. А. Стеклова Российской академии наук

Актуальность ресурсосбережения в наше время как никогда высока. В рамках этого стратегического направления лежит вопрос о восстановлении каталитической активности отработанного катализатора, одним из методов которого является окислительная регенерация. Она заключается в выжиге отложений с зерен катализатора. Хорошо известна проблематика процессов горения: с одной стороны, для глубокого тщательного выжигания необходимо длительное воздействие высоких температур, с другой – необходимо минимизировать температурное воздействие на катализатор во избежание его порчи. Помимо этой очевидной проблемы возникает множество других, например, температурные забросы неясной этимологии, неконтролируемое распространение фронта горения по слою и т. д. Трудности в реализации натуральных экспериментов обуславливают использование математического моделирования для исследования процесса окислительной регенерации.

Математическая модель окислительной регенерации катализатора как модель каталитического процесса включает в себя несколько частей: кинетическая модель, модель зерна, модель слоя. Они являются системами нелинейных дифференциальных уравнений и описывают основные процессы, протекающие в ходе регенерации: теплообмен, массообмен, теплоперенос, диффузию и конвективные потоки, обладающие различными характерными временами. Вычислительные алгоритмы для них достаточно трудоемки, требуют либо применения явных численных методов с целью распараллеливания алгоритмов, либо использования неявных абсолютно устойчивых разностных схем. Задачи исследования подобных моделей качественными методами нетривиальны, зачастую теоретические условия применения труднодостижимы на практике.

Доклад посвящен исследованию процесса окислительной регенерации зерна катализатора с детальной кинетикой средствами математического моделирования.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-71-30012.