

Федеральное агентство научных организаций

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ МЕХАНИКИ  
ИМ. С.А. ХРИСТИАНОВИЧА  
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 54.03:538.9:539.3:678.01  
№ госрегистрации 01201351883  
Инв. № 16/17

УТВЕРЖДАЮ

Директор

чл.-корр. РАН



А.Н. Шиплюк

2016 г.

ОТЧЕТ  
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ  
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ  
(заключительный)

№ 0323-2014-0013

Приоритетное направление III.23. Механика деформирования и разрушения материалов, сред, изделий, конструкций, сооружений и триботехнических систем при механических нагрузках, воздействии физических полей и химически активных сред

Программа ФНИ СО РАН III.23.4. Механика гетерогенных, композитных сред и технологии на их основе

Протокол Ученого совета ИТЛМ СО РАН  
№ 12 от «01» 12 2016 г.

Руководитель проекта  
к.ф.-м.н.

(подпись, дата)

Краус Е.И.

Новосибирск, 2016

## СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Организация-Исполнитель: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук

Руководитель проекта:

Заместитель директора,  
к.ф.-м.н.



подпись, дата

13.01.17

Краус Е.И. (введение, раздел 3,  
заклучение)

Исполнители проекта

программист

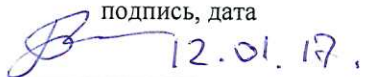


подпись, дата

12.01.17

Александрова Н.К. (раздел 5, 6)

с.н.с., к.ф.-м.н.

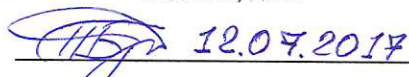


подпись, дата

12.01.17

Болеста А.В. (раздел 1)

м.н.с.

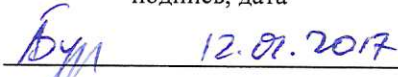


подпись, дата

12.07.2017

Брусенцева Т.А. (раздел 2)

н.с., к.ф.-м.н.

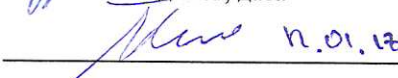


подпись, дата

12.01.2017

Бузюркин А.Е. (раздел 4)

с.н.с., к.ф.-м.н.

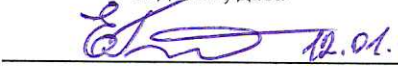


подпись, дата

11.01.17

Головнев И.Ф. (раздел 5, 6)

с.н.с., к.ф.-м.н.

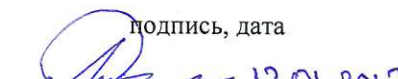


подпись, дата

12.01.17

Головнева Е.И. (раздел 5, 6)

м.н.с.

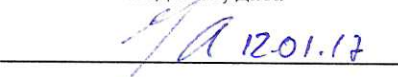


подпись, дата

12.01.2017

Демьяненко А.М. (раздел 5, 6)

с.н.с., к.ф.-м.н.

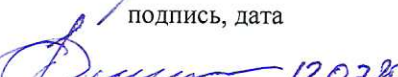


подпись, дата

12.01.17

Уткин А.В. (раздел 5, 6)

м.н.с.

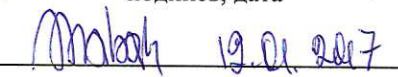


подпись, дата

12.07.2017

Филиппов А.А. (раздел 2)

с.н.с., к.ф.-м.н.



подпись, дата

19.01.2017

Шабалин И.И. (раздел 3)

## РЕФЕРАТ

**Объем отчета:** 82 стр., 60 рисунков, 3 таблицы, 2 приложения.

**Дата начала и окончания НИР:** 2013-2016

**Ключевые слова и словосочетания:** метод молекулярной динамики, кластеры, тонкие пленки, механические характеристики, поверхность, нанопорошки, синтез, композиционные материалы, уравнение состояния.

**Цели проекта:** получение новых научных знаний по моделированию термомеханических процессов в конденсированных средах.

Настоящий отчет является заключительным по теме «Моделирование термомеханических процессов в конденсированных средах», по которой были представлены отчеты по этапам за 2013-2015 года.

Результатом выполнения проекта, является законченные комплексные исследования, включающие математическое моделирование на макро- и микроуровне процессов, протекающих при статическом и динамическом нагружении исследуемых материалов, экспериментальное получение керамических образцов и, по возможности, внедрение полученных технологий в производство. Все поставленные в проекте задачи решены в полном объеме. Все результаты научных исследований, полученные за отчетный период, соответствуют мировому уровню или превосходят его.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение .....	5
1 Построение фазовых диаграмм ультрадисперсных металлов с помощью молекулярно-динамического моделирования .....	9
2 Получение зависимости модуля упругости от концентрации пластифицирующей добавки при сжатии гетерогенных материалов, полученных методами горячего и холодного прессования на основе высокотвердой керамики .....	14
3 Разработка алгоритма создания однородных 3D тетрагональных сеток в произвольных многосвязных объектах для численного анализа свойств материалов и конструкций .....	27
4 Численное моделирование компактирования пористых керамических порошков.	37
5 Создание комплекса программ в рамках метода молекулярной динамики для расчета усталостного разрушения под действием внешнего циклического напряжения и скорости в наноразмерных материалах повышенной прочности .....	43
5.1 Физическая модель.....	44
5.2 Импульсное постоянное внешнее напряжение .....	45
5.3 Постоянное внешнее напряжение, нарастающее квазистатически .....	49
5.4. Гармоническое внешнее напряжение.....	51
6 Разработка и отладка комплекса программ для расчета механических характеристик наноразмерного металло-керамического образца при его растяжении с постоянной скоростью деформации.....	55
6.1 Металлические структуры.....	55
6.2 Керамические структуры.....	58
Заключение.....	66
Список использованных источников .....	73
Приложение 1 Перечень статей, опубликованных по тематике проекта в 2016 г. в соответствии с государственным заданием.....	78
Приложение 2 Количество статей, опубликованных по тематике проекта в 2013-2016 г. в соответствии с государственным заданием .....	82



## **Введение**

Современное состояние моделирования процессов и поведения конденсированных сред при умеренных и высокоинтенсивных нагрузках характеризуется высоким уровнем развития вычислительных возможностей. Для проведения расчетов широко используются мощные суперкомпьютеры, многопроцессорные и кластерные системы с сотнями тысяч процессоров. Глубоко и всесторонне проработаны численные методы. Созданы многофункциональные и многопрофильные пакеты программ и коды, в том числе и коммерческие. При этом явно прослеживается значительное отставание в моделях, адекватно описывающих реальные процессы. Превалируют варианты модификаций классических феноменологических моделей, построенных еще в позапрошлом веке и базирующихся, в основном, на данных квазистатических экспериментов. Это не означает, что нет попыток выхода на модели нового уровня, базирующиеся на описании или учете физических механизмов необратимого деформирования. Они есть, но это отдельные работы, в то время как для массовых расчетов, и даже в разрабатываемых пакетах и кодах, продолжают использоваться модификации старых моделей, не отвечающие современному уровню представлений о механизмах деформирования.

Используемые в настоящее время модели можно условно разделить на три больших группы: макроскопические, микроструктурные, атомистические. К первым относятся традиционные модели упругопластического деформирования, т.е. модели механики сплошных сред. Во второй группе – модели, основывающиеся на описании микроструктурных механизмов необратимого деформирования. К третьей группе относятся молекулярно – динамические модели. Особую категорию составляют наиболее перспективные, с точки зрения авторов проекта, многоуровневые модели, позволяющие объединить преимущества каждого из перечисленных подходов.

В моделях первой группы фактически осуществляется модификация классических моделей упругопластического деформирования введением

зависимости предела текучести от характерных параметров процесса, в первую очередь, от скорости деформации и температуры. При этом уравнение состояния остается гидродинамическим, т.е. его удельная внутренняя энергия зависит только от гидростатического давления.

Широкое распространение в изучении термодинамических свойств материалов получил метод молекулярной динамики (ММД). Переход от ММД к построению уравнений состояния возможен с помощью методов статистической физики. Следует отметить, что на данный момент реализация возможностей ММД сдерживается необходимостью привлечения больших вычислительных мощностей, а именно, суперкомпьютеров, распараллеливания на большое количество процессоров.

Мощные лазеры с ультракоротким импульсом – это важнейший инструмент научных исследований в механике деформируемого твердого тела. В результате воздействия сверхмощного пучка тонкий поверхностный слой вещества облученной мишени переходит в неравновесное состояние, когда электронная подсистема металла сильно перегрета относительно кристаллической решетки. Продолжительность этого состояния ограничена во времени и определяется временами электронной и решёточной релаксации. В перегретом слое температура достигает нескольких тысяч градусов, а давления десятков ГПа, что позволяет выполнить верификацию уравнений термодинамического состояния вещества, а также, по измерениям профилей давления внутри тела, судить о волновых процессах, связанных с определяющими соотношениями. По скорости тыльной поверхности можно идентифицировать процессы разрушения. Структура волн и динамика волновых взаимодействий определяются термодинамическими уравнениями состояния вещества, определяющими соотношениями деформирования и процессами разрушения в материале.

Недавние измерения сопротивления деформированию и разрушению монокристаллического алюминия в условиях ударно-волнового нагружения обнаружили аномальное возрастание предела текучести с температурой. Эта аномалия интерпретирована как свидетельство изменения основного механизма

торможения дислокаций. Остается, однако, неясным, в какой мере соотносятся температурные зависимости предела текучести при высокоскоростном деформировании монокристаллов и поликристаллического алюминия и при каких скоростях деформирования начинает проявляться эффект аномального термического упрочнения. Представленные результаты измерений динамического предела текучести сплавов алюминия при нормальной и повышенной температурах не носят систематического характера и недостаточны для выявления кинетических закономерностей высокоскоростного деформирования.

В последние годы в России и за рубежом проводятся интенсивные работы в области создания противопульной бронезащиты на основе керамических материалов. Благодаря меньшему весу, керамическая бронезащита может применяться в средствах индивидуальной защиты и транспортных средствах, где есть ограничения по весу и одновременно требуется высокая пулестойкость. Однако ресурсы повышения защитных свойств бронезащиты с использованием традиционных керамических материалов на данном этапе практически исчерпаны. Новым направлением в улучшении физико-механических свойств керамики может стать применение наноматериалов. Прикладной интерес к наноматериалам обусловлен возможностью значительной модификации и даже принципиального изменения свойств известных материалов при переходе в нано-кристаллическое состояние. Применение таких материалов позволяет сформировать устойчивую высокодисперсную структуру с повышенной плотностью, которая характеризуется высокими значениями твердости и прочности. Это предположение основывается на обратной зависимости прочности материалов от размера зерна, а также на том, что образование и рост трещин критического размера в материалах с мелкозернистой структурой тормозится из-за малого размера структурных фрагментов и наличия большого числа границ. В современной технике активно применяются различные способы компактирования нанопорошков: высокоскоростная электроимпульсная консолидация под давлением, холодное и термическое прессование, детонационный синтез и др. Однако определение параметров компактирования для каждого материала становится отдельной задачей, так как при достижении некоторых

значений давления и температуры, наночастицы материала начинают агломерироваться, что приводит к росту накопления пор и микротрещин. Кроме того, при компактировании не учитывается варьирование частиц по размерам фракций. Оптимизация состава нанопорошков по размеру может привести к увеличению плотности получаемых материалов, а использование особой укладки поможет при решении проблем роста внутренних дефектов.

## **1 Построение фазовых диаграмм ультрадисперсных металлов с помощью молекулярно-динамического моделирования**

Вопрос влияния структурного состояния поликристаллических металлов и сплавов на их термомеханические свойства является чрезвычайно важным в применении к задаче создания новых нанокристаллических высокотвердых материалов и определения их упругих модулей, предела текучести и ударной адиабаты.

Моделирование проводилось методом молекулярной динамики (МД). Взаимодействие атомов меди рассчитывалось в рамках метода внедренного атома. Расчет траекторий движения проводился с помощью параллельного молекулярно-динамического пакета LAMMPS. Для формирования начальных данных атомы размещались в расчетной ячейке в соответствии с гранецентрированной кубической решеткой. Затем полученная система разогревалась выше точки плавления, при постоянном давлении. Полученный расплав резко охлаждался при атмосферном давлении до температур от 400 до 1200 К, после чего в процессе эволюции системы, при постоянной температуре, в ней происходит гомогенная нуклеация кристаллитов меди, которые растут в течение нескольких десятков наносекунд, формируя поликристалл. Затем для остановки роста зерен система охлаждалась до комнатной температуры 300 К. Различные режимы нуклеации и роста зерен приводят к формированию поликристаллического состояния с различной величиной среднего размера зерна. Так как в алюминии нуклеация идет существенно дольше, рассчитанные поликристаллические конфигурации для меди использовались как базисные для получения поликристаллического состояния для алюминия путем релаксации к заданным давлению и температуре. Для выявления локального структурного состояния системы атомов, наряду с классической парной функцией радиального распределения, применялся анализ по ближайшим соседям, позволяющий выявлять атомы с локальной координацией, соответствующей гранецентрированной кубической (ГЦК), гексагональной плотноупакованной (ГПУ) и объемно-центрированной кубической (ОЦК) кристаллическим решеткам и



неупорядоченной фазе. Для вычисления среднего размера зерна в системе вводилось понятие ГЦК+ГПУ кластера – множества всех связанных атомов с ГЦК и ГПУ локальной координацией. Понятие двух связанных атомов вводилось как условие того, что расстояние между ними в заданный момент времени меньше определенного, вычисляемого как первый минимум в парной функции радиального распределения. В результате выявления всех, определенных таким образом, ГЦК+ГПУ кластеров, было рассчитано среднее количество атомов, им принадлежащих, и их средний диаметр  $d$  исходя из предположения о сферической форме кластеров, что в общем случае верно только с некоторой точностью. В связи с тем, что алгоритм анализа по ближайшим соседям с ростом температуры в силу роста флуктуаций межатомных расстояний может для некоторых атомов, находящихся в упорядоченной фазе, выдавать неправильную координацию, чаще всего относя их к неупорядоченной фазе, в работе дополнительно использовался расчет структурного фактора.

Моделирование ударно-волнового нагружения материала производилось путем введения в систему ударника, движущегося с постоянной заданной скоростью. В такой постановке задачи время наблюдения за состоянием вещества за фронтом ударной волны ограничено временем распространения ударной волны по расчетной ячейке, что составляет всего несколько десятков пикосекунд. Поэтому для выявления более длительной динамики эволюции структурного состояния вещества за фронтом также применялся алгоритм гюгониостата.

Первый вопрос, который возникает в связи с анализом структурного состояния за фронтом волны, это при каком давлении во фронте материал расплавится. Полное плавление меди за фронтом регистрировалось с помощью построения структурного фактора и происходило при  $P_x = 220 - 230$  ГПа, что совпадает с полученными ранее результатами экспериментальных и МД исследований. Поликристалл с самым малым размером зерна 2 нм плавится несколько раньше при давлении 205 ГПа. Но если проследить за эволюцией структуры ударно-сжатого материала при значительно меньших давлениях (от 100 ГПа), то можно увидеть, что и в данном случае сразу за фронтом волны большая

часть атомов также теряет локальную координацию, связанную с какой-либо кристаллической структурой. Ранее этот эффект в работе был назван виртуальным плавлением. Механизм данного разрушения кристаллической структуры связан с тем, что в силу негидростатического характера нагружения в объеме за фронтом ударной волны возникают большие касательные напряжения, связанные с девиаторной частью тензора напряжения. В процессе сжатия касательное напряжение достигает максимума от 3 до 4 ГПа, в зависимости от давления за фронтом, а затем происходит его резкое падение, сопровождающееся значительным уменьшением количества атомов, обладающих кристаллической координацией. При этом большая часть этих атомов ( $> 95\%$ ) находится уже в локальной координации, соответствующей ОЦК решетке и затем их количество медленно растет. Проследить эволюцию внутренней структуры ударно-сжатого материала удобнее всего при давлении  $P_x = 200$  ГПа, лишь немного меньшем, чем давление полного плавления меди за фронтом. В данном случае температура максимальна, но полное плавление за фронтом еще не происходит. В результате уже за время 0.3 нс все атомы с ОЦК координацией собираются в объем, форма которого близка к цилиндрической. Факт того, что атомная структура в этой цилиндрической области обладает ОЦК решеткой, подтверждается также вычислением структурного фактора (рисунок 1.1). Три максимума на рисунок 1.1 являются (110), (200) и (211) рефлексами для ОЦК кристалла с параметром решетки 0.25 нм. Расчеты структурного фактора и коэффициента диффузии отдельно внутри и вне цилиндра показывают, что вне цилиндра атомы не упорядочены (рисунок 1.1) и коэффициент диффузии примерно в 100 раз выше. Это позволяет заключить, что вне цилиндра находится жидкая фаза, с которой сосуществует твердая ОЦК фаза. Граница раздела между ними в процессе эволюции приняла цилиндрическую форму с осью цилиндра, направленной вдоль направления, в котором происходило сжатие, что вызвано необходимостью минимизации межфазной границы. Для подтверждения того, что факт образования ОЦК меди в ударно-сжатом состоянии не связан с особенностями применения к системе атомов алгоритма гюгониостата, были проведены прямые расчеты распространения ударной волны, возбуждаемой с помощью ударника. Несмотря на

то, что время прохождения ударной волны по расчетной ячейке слева направо составляло около 7 пс, отчетливо можно было наблюдать зарождение и рост ОЦК кластеров за фронтом.

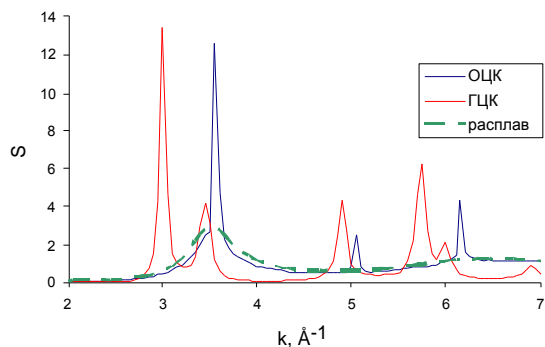


Рисунок 1.1 - Структурный фактор, рассчитанный для состояния, в котором за фронтом ударной волны давлением 200 ГПа в поликристаллической меди сосуществуют ОЦК фаза меди и расплав. Также приведен структурный фактор ГЦК структуры начального недеформированного поликристалла

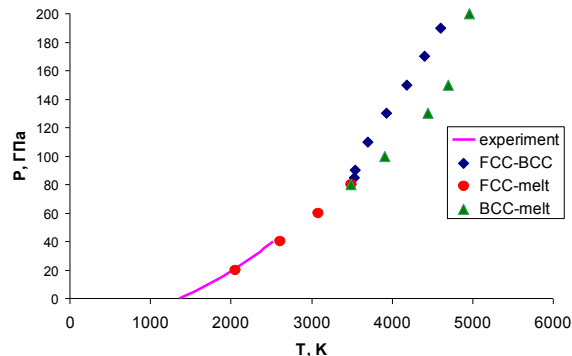


Рисунок 1.2 - Фазовая диаграмма меди, полученная в результате молекулярно-динамических расчетов

Тот факт, что в МД расчетах при давлении большем 100 ГПа и температуре большей 2000 К стабильной оказывается именно ОЦК, а не ГЦК фаза не был ранее отмечен в литературе, хотя в работах [1,2] расчеты также проводились в близком к полному плавлению режиме распространения ударной волны и с использованием того же потенциала межатомного взаимодействия. Возможно, это вызвано применением в [1,2] для распознавания полученного фазового состояния только парной корреляционной функции и параметра центросимметрии, что недостаточно для полноценного структурного анализа при столь высоких температурах. Также стоит отметить, что при низких температурах стабильной будет именно ГЦК структура вплоть до самых высоких давлений, что подтверждается проведенным в настоящей работе сравнением энергий ГЦК и ОЦК решеток при нулевой

температуре. Энергия ГЦК решетки меньше вплоть до давления 300 ГПа. Фазовая диаграмма меди строилась методом сосуществования фаз. Фазовый переход происходит вследствие того, что энтропия ОЦК фазы больше (рисунок 1.2). Положение тройной точки на фазовой диаграмме (рисунок 1.2) позволяет рассчитать эту разность энтропий в расчете на один атом:

$$\Delta s = s_{\text{ОЦК}} - s_{\text{ГЦК}} = 0.12 k_B,$$

где  $k_B$  - постоянная Больцмана.

## **2 Получение зависимости модуля упругости от концентрации пластифицирующей добавки при сжатии гетерогенных материалов, полученных методами горячего и холодного прессования на основе высокотвердой керамики**

С формированием наноструктуры в материале существенно уменьшается количество внутренних дефектов, приводящих к преждевременному разрушению материала. Получение наноструктуры достигается путем компактирования нанодисперсных порошков при определенных параметрах давления, скорости приложения нагрузки и температуры. Кроме того, получение наноструктурированных сверхтвердых материалов связано с дисперсностью порошков, распределением по размерам частиц, свойств исходного материала порошка. Определение параметров компактирования с сохранением наноструктуры материала представляет интерес для исследователей всего мира. Так в ряде работ продемонстрировано увеличение различных механических характеристик при использовании субмикронных порошков карбида бора.

Большое влияние на физико-механические характеристики оказывает влияние различных добавок в смесь порошков карбида бора. Свободный углерод не способствует улучшению механических характеристик прессованного материала. В то же время, углерод в соединениях способствует увеличению твердости и модуля упругости. Кроме того, добавки боридов титана увеличивают твердость композита, прочность на изгиб. Влияние карбидов вольфрама, кремния, ванадия, титана, хрома улучшает механические свойства только при небольших концентрациях. Использование кремния, алюминия, титана увеличивает трещиностойкость спекаемого карбида бора.

Низкокачественным и отходным промышленным сырьем являются промышленные отходы, содержащие карбид бора. На ОАО «Авиабор» при производстве треххлористого бора образуются отходы в виде огарков, содержащие 10-20% карбида бора. На основе данного сырья в ООО «ПИХТ» комбинированным



химическим и механическим способом были получены высокочистые порошковые смеси карбида бора с содержанием нанодобавки от 5% до 15% масс.

В качестве материалов для исследования были выбраны порошки карбида бора различной дисперсности:

1. Порошок со средним размером частиц 8-10 мкм. Добавки наночастиц отсутствовали (рисунок 2.1, слева).

2. Порошок со средним размером 3,6 мкм. Добавка наноразмерного порошка – около 5% (рисунок 2.1, справа).

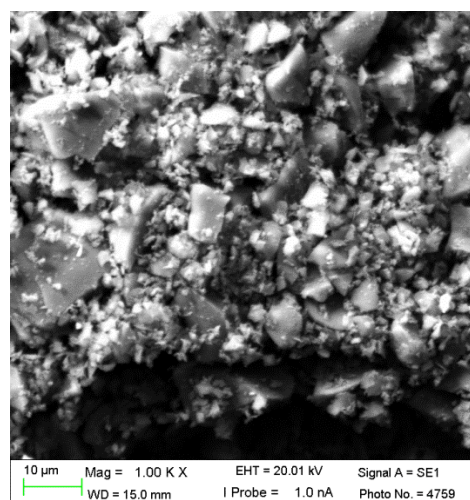
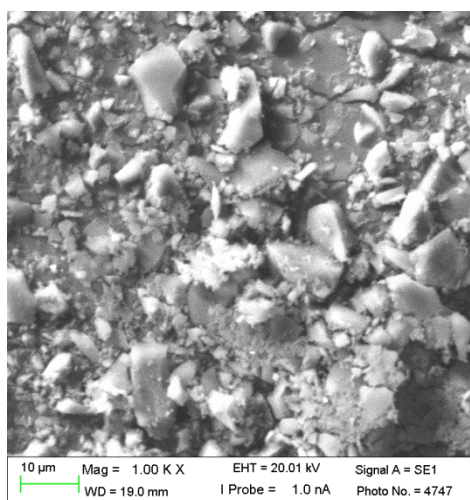


Рисунок 2.1 - СЭМ-фотографии порошков

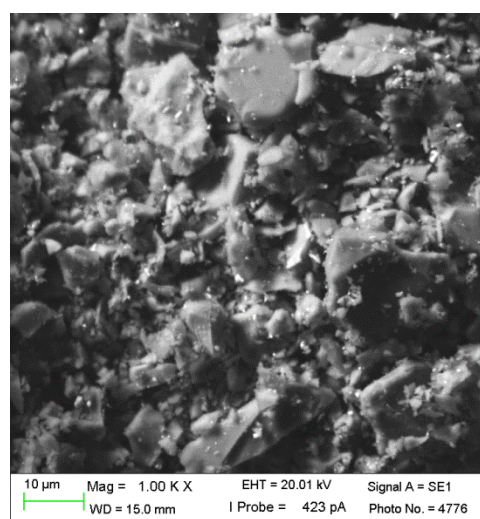
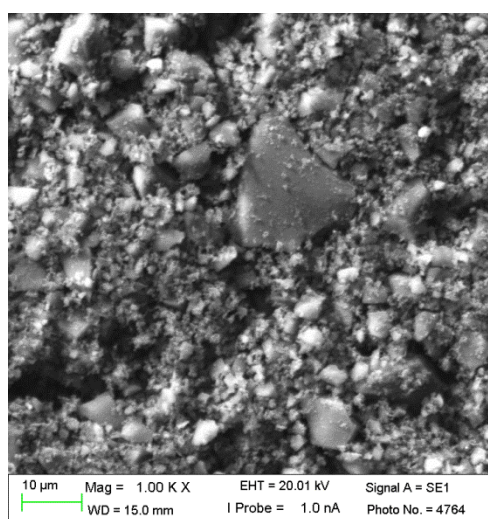


Рисунок 2.2 - СЭМ-фотографии порошков

3. Порошок со средним размером 2,4 мкм. Добавка наноразмерного порошка около 10% (рисунок 2.2, слева). Порошки компании ПИХТ отличаются высокой чистотой сырья (>99% В<sub>4</sub>С), широким распределением по размеру и отсутствием агломератов.

4. Порошок диборида титана со средним размером 20 мкм (рисунок 2.2, справа).

5. Порошок компании FCT. Исходный порошок представлял собой гранулы, состоящие из оболочки и ядра. Спектральный анализ порошка показал, что оболочка зерна на 95% состоит из бора и углерода, а внутри содержит частицы, состоящие из кремния и углерода (рисунок 2.3). Следует заметить, что средние размеры порошков, заявленные изготовителем, соответствуют микрофотографиям, однако во всех трех типах порошков наблюдаются крупные частицы размерами больше 20 мкм.

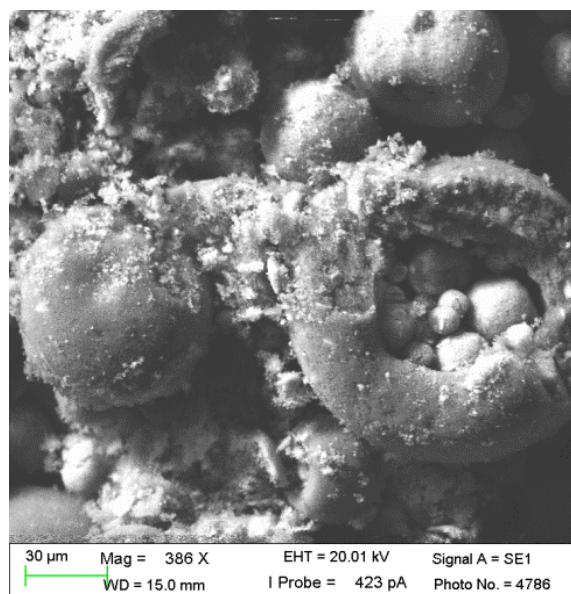
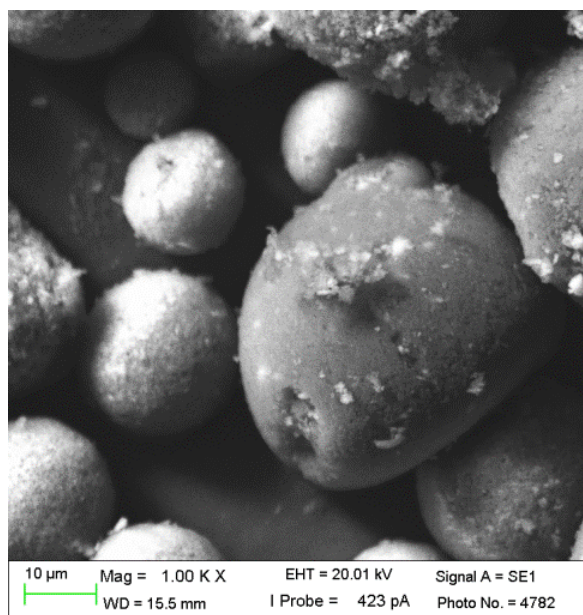


Рисунок 2.3 - СЭМ-фотографии порошка FCT:  
слева – с целой оболочкой, справа – с расколотой

6. Порошок диоксида кремния различной дисперсности.

Для отработки влияния дисперсного состава на механические свойства диоксида кремния при различной дисперсности были использованы частицы

кварцевого песка, предварительно классифицированные на вибросите от 100 до 350 мкм (таблица 2.1).

Таблица 2.1 – Классификация кварцевого песка по дисперсности

Номер фракции	Насыпная плотность, кг/м <sup>3</sup>	Размер частиц $r$ , мкм
1	1,919	355-280
2	1,852	280-250
3	1,834	250-200
4	1,789	200-180
5	1,779	180-140

В качестве используемого оборудования для спекания порошков был использован лабораторный горячий пресс производства (далее Горячий пресс) КТИ НП СО РАН. Он состоит из электромеханического пресса, камеры с горячей зоной, системы водяного охлаждения, системы заполнения камеры инертным газом, компьютерной системы управления, регулируемого источника питания.

Для порошков твердых веществ, имеющих высокую температуру плавления применение холодного прессования практически не осуществимо из-за крайне низкой скорости диффузии в веществе. Процесс горячего прессования позволяет получать из прессуемого порошка спеченные компакты, механическое поведение которых можно описать поведением сплошного гетерогенного деформируемого твердого тела.

Технологический процесс прессования был выбран следующим:

1. Засыпка исходного вещества в графитовую форму в количестве  $2 \pm 0,01$  г
2. Ввод формы в рабочую (горячую) зону
3. Преднагрузка 10 кг с автоматической поддержкой нагружения
4. Откачка воздуха из формы до достижения давления  $3 \pm 2$  кПа
5. Заполнение формы инертным газом (аргоном) до величины  $30 \pm 10$  кПа
6. Нагружение пуансона до требуемого усилия  $F \pm 50$ Н и автоматическое поддержание в заданном диапазоне.

7. Нагрев формы до требуемой температуры  $T \pm 10\text{K}$  с постоянной скоростью 50 К/мин и автоматическое поддержание в заданном диапазоне.

8. Выдержка всех параметров в течении требуемого времени

9. Охлаждение формы до комнатной температуры со скоростью 50 К/мин

10. Снятие нагрузки с пуансона

11. Заполнение формы атмосферой

12. Вывод формы из рабочей зоны

Для определения механических характеристик была использована универсальная испытательная машина. Для экспериментального изучения механических свойств исследуемых материалов использовалась испытательная установка Zwick/Roell Allround Z 005. Испытательная установка позволяет обрабатывать данные в режиме реального времени с частотой до 500 Гц. Контроль и управление ориентированы на определение события при испытании. Управление блоком testcontrol осуществляется через ПК и программу TestxpertII.

С помощью программного обеспечения TestxpertII возможно выдерживать разные типы нагружения:

- Постоянная скорость нагружения
- Постоянная скорость деформации
- Задание предварительной нагрузке (по характеру, величине и скорости)
- Возможность обнуления значения тензодатчиков.
- Автоматический расчет деформации и модуля упругости при задании

размеров образца.

Перечисленные возможности позволяют испытывать материалы с заданной точностью, строить все типы диаграмм, рассчитывать механические характеристики, поэтому использование установки в работе помогло решить большую часть задач, связанных с экспериментальными методами определения модуля упругости.

Для определения структуры и строения объектов в работе использовался сканирующий (растровый) электронный микроскоп Zeiss EVO MA 15 с пространственным разрешением до 5 нм при 30 кв.

В качестве формы для прессования была использована цилиндрическая матрица внешним и внутренним диаметром 40 и 16 мм соответственно. В результате были получены образцы в форме таблеток (цилиндров) диаметром 16,2-16,3 мм и высотой 2 мм. Стенки матрицы были проложены графитовой бумагой для продления срока службы графитовой формы.

На 7 этапе наблюдался вначале рост усилия со стороны сжимаемого вещества (тепловое расширение) с 1500 до 5500 Н (при  $T=1950$  К). После достижения температуры  $T=1900-2000$  К наблюдалось уменьшение усилия, связанное с уплотнением порошкового материала, вследствие различных механизмов спекания: движения дислокаций, диффузионного обмена между частицами, действия сил поверхностного натяжения. При достижении температуры  $T=2300\pm 50$  К, усилие прессования падало до 3500-4000 Н. Увеличение усилия прессования до  $7500\pm 20$  Н приводило к уплотнению порошкового материала.

Для определения модуля упругости и прочности спрессованных таблеток были проведены испытания на квазистатическое сжатие. Предварительно измеренные таблетки укладывались между двумя стальными пластинами. Нижняя пластина была закреплена, а верхняя перемещалась вместе с траверсой. Нагружение осуществлялось с постоянной скоростью перемещения траверсы 0,4 мм/мин. В качестве ограничений были выбраны пределы по усилию 3000 Н, по деформации – 10%. Измерение модуля упругости для всех образцов осуществлялось на участке от 2 до 7% деформации.

В результате механических испытаний 3 серий образцов, соответствующих спекаемым порошкам ПИХТ; ПИХТ-3,6; ПИХТ-2,4, содержащих по 5 испытываемых таблеток была построена зависимость Модуля сжатия от среднего размера порошка. Разброс значений в рамках одной серии составил 10%.

На рисунке 2.4 прослеживается тенденция к росту модуля сжатия при уменьшении размера на 20% с  $106\pm 10$  МПа для порошка ПИХТ до  $127\pm 10$  МПа для порошка ПИХТ-2,4.



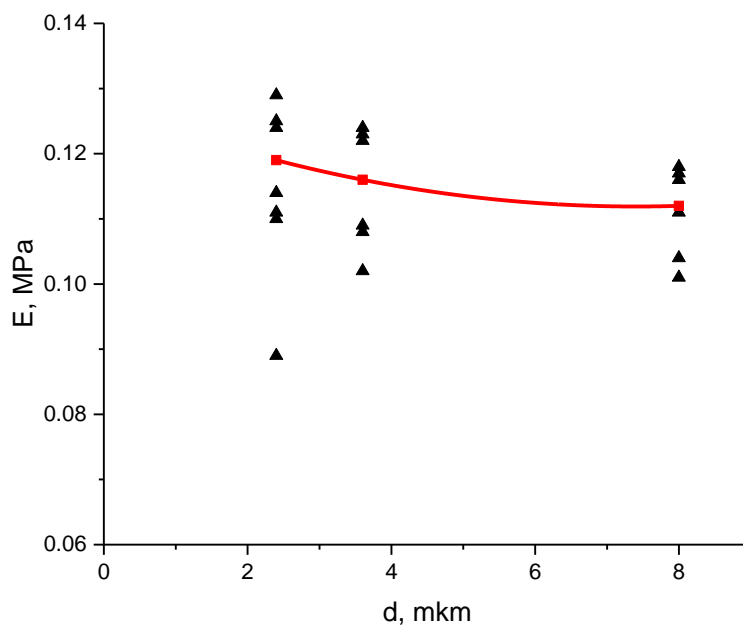


Рисунок 2.4 - Зависимость модуля упругости при сжатии от среднего размера частиц порошка

Применение легирующих добавок не дало положительного вклада в рост модуля сжатия. Снижение модуля составило 3 и 6% для смеси порошков  $V_4C+TiB_2$  (соотношение по массе 9 к 2) и гранулята FCT соответственно (рисунок 2.5).

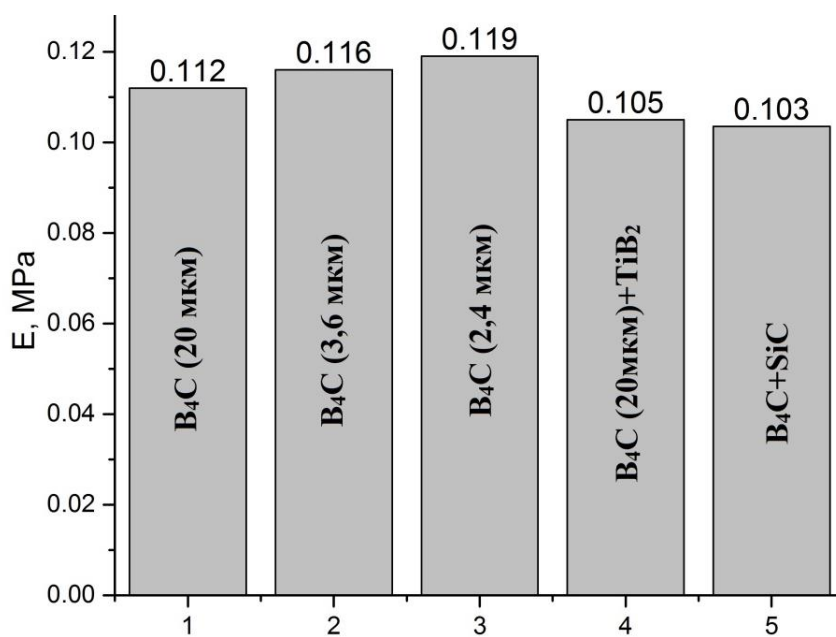


Рисунок 2.5 - Зависимость модуля сжатия от типа порошка

Спеченные образцы, после механических испытаний были частично расколоты. Осколки были покрыты тонким проводящим слоем металла и изучены на электронном микроскопе. Для образцов типов 1-3 наблюдается высокая плотность исследуемых сколов, чешуйчатая структура поверхности с различным размером зерна (рисунок 2.6).

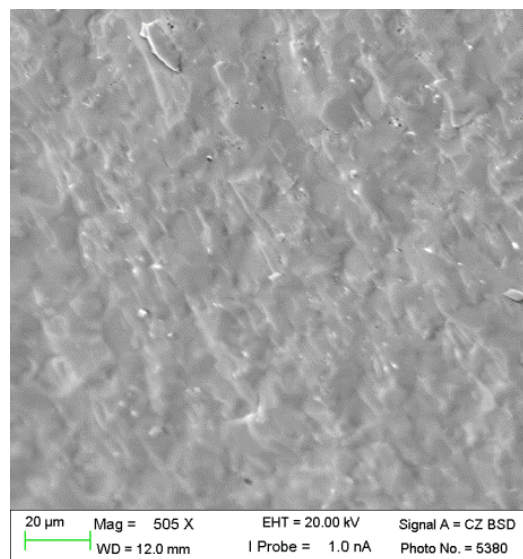
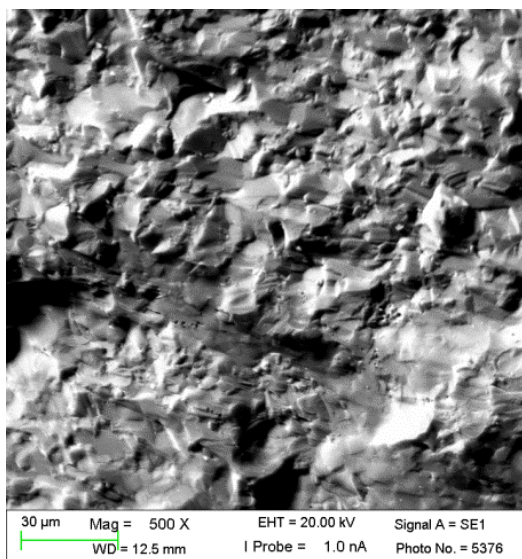


Рисунок 2.6 - СЭМ-фотография скола образца ПИХТ в детекторе вторичных электронов (слева) и в детекторе обратно-рассеянных электронов (справа)

Для образцов типа 2,3 характерны более гладкая поверхность, но, при этом, большее количество дефектов, таких как поры и трещины (рисунок 2.7). Поры представляют собой треугольники с закругленными краями, образующиеся в пустотах между частицами. Подобные дефекты приводят с одной стороны к росту модуля сжатия, но, с другой стороны, концентраторами напряжений и трещинообразователями. Характерно, что при более высоком модуле сжатия все образцы ПИХТ-2,4 были разрушены. В то же время, таблетки порошка ПИХТ (тип 1) не разрушились.

Для смеси карбид бора - диборид титана характерно как высокое содержание мелких пор в образце, так и разрушение включений из диборида титана после механических испытаний (рисунок 2.8).

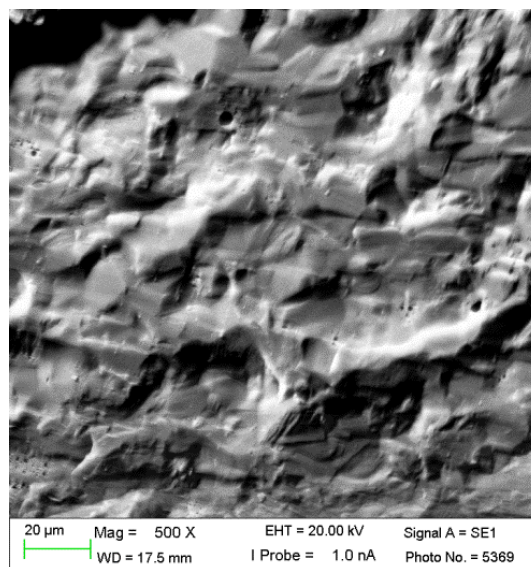
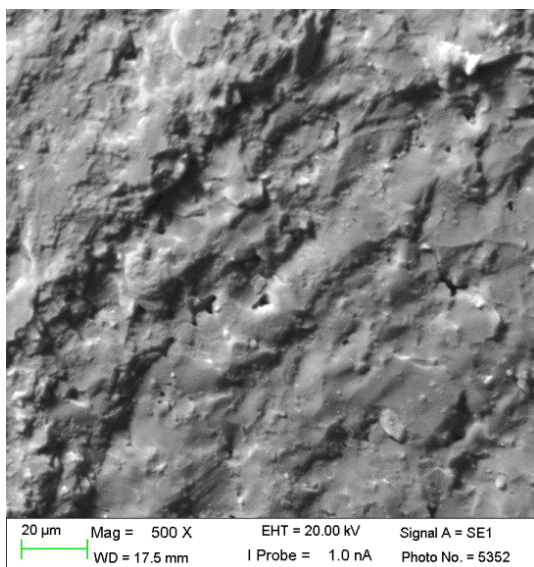


Рисунок 2.7 - СЭМ-фотографии сколов образцов

ПИХТ 3,6 (слева) и ПИХТ 2,4 мкм (справа) в детекторе вторичных электронов

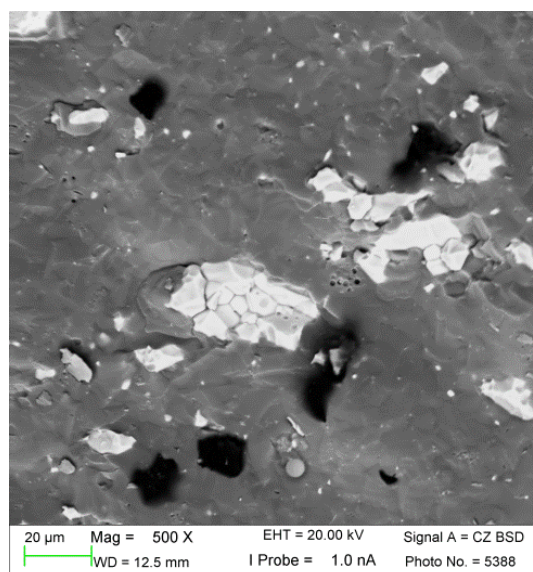
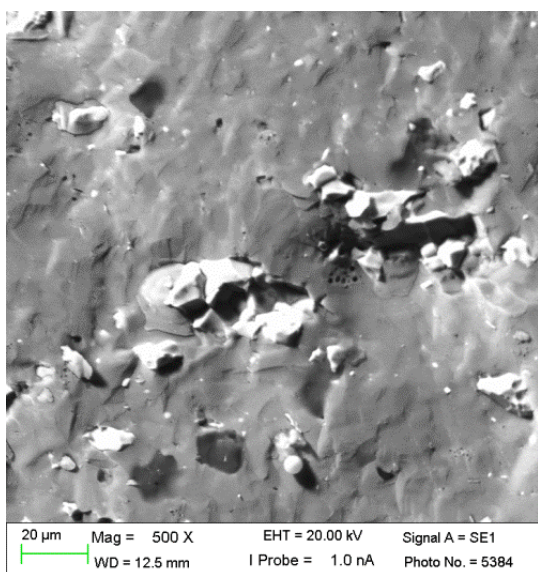


Рисунок 2.8 - Карбид бора с карбидом титана в детекторе вторичных электронов (слева) и в детекторе обратно-рассеянных электронов (справа)

Для карбида бора с кремнием (тип 5), несмотря на хорошую адгезию между компонентами, имеет высокое содержание пор между частицами кремния, приводящее как снижению модуля сжатия, так и быстрому разрушению таблетки (рисунок 2.9).

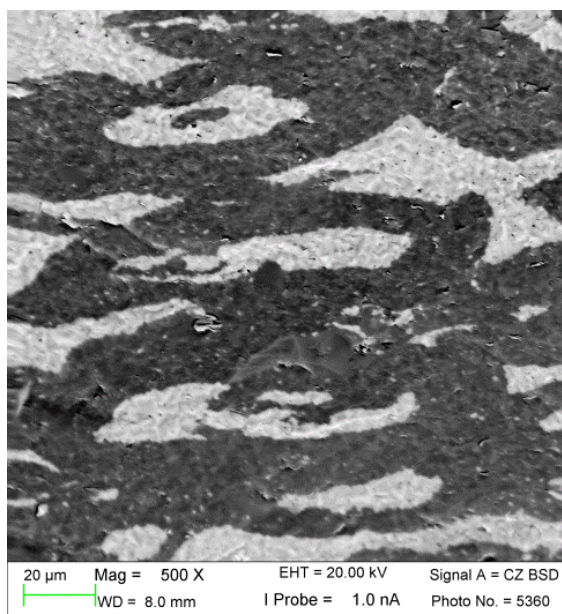


Рисунок 2.9 - Гранулят FCT в детекторе обратно-рассеянных электронов

Изготовление порошка диоксида кремния осуществлялось при одном и том же режиме прессования: приложение усилия на пуансон до достижения давления в  $P=45$  МПа, затем равномерный нагрев с постоянной скоростью  $50^{\circ}\text{C}/\text{мин}$  в инертной атмосфере (аргон). Максимальная температура составила  $T=1400^{\circ}\text{C}$ . Выдержка указанных параметров осуществлялась в течении 40 минут.

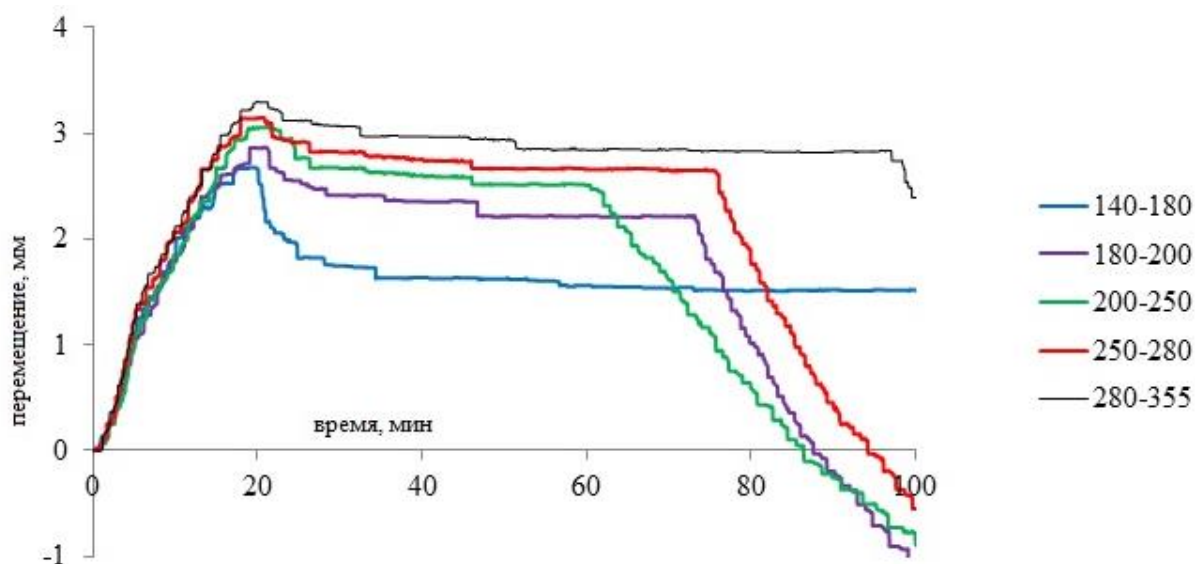


Рисунок 2.10 - Тепловое расширение и усадка порошков различной дисперсности



На рисунке 2.10 первоначальный этап имеет нелинейный характер, однако начиная от 675 К (10 мин) можно выделить линейный участок теплового расширения порошка. Начиная от  $T=1000-1150$  К (19-21 мин) характер кривой снова меняется на нелинейный в сторону уменьшения, что свидетельствует о происходящем прессовании. В определенный момент скорость теплового расширения и скорость усадки порошка сравниваются (пик для каждой кривой). При достижении заданной температуры и выдержки всех параметров происходила усадка порошка. Именно данным этапом и были охарактеризованы спекаемые порошки, а именно сравнены скорость и величина усадки. После выдержки в течение 40 мин происходило остывание спекаемого вещества – на графике наблюдается уменьшение объема спекаемого вещества. Нелинейность процесса объясняется продолжающимся процессом усадки. При снятии нагрузки верхний пуансон движется вверх, расширение прессуемого вещества происходит линейно. С уменьшением дисперсности порошка значительно ускоряются диффузионные процессы, что приводит к увеличению как скорости спекания.

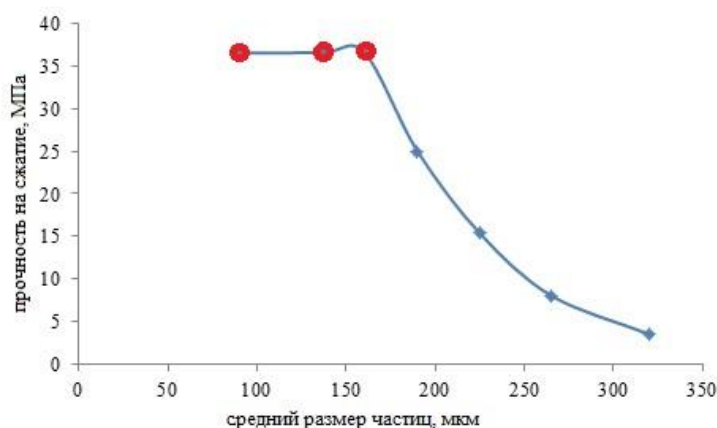


Рисунок 2.11 - Зависимость прочности сжатия от размера фракции

Полученные спеченные образцы испытывались на одноосное сжатие при постоянной скорости перемещения траверсы 3 мм/мин (рисунок 2.11). При сжатии таблетки небольшое расширение в плоскости, перпендикулярной к направлению сжатия, а затем развитие трещин от краев к центру. Образцы, спеченные из крупных фракций, были разрушены до частиц исходного порошка, но с



уменьшением размера фракции разрушенные таблетки представляли собой фрагменты цилиндра, способные к сопротивлению нагрузке. Предел максимальной силы испытательной установки не позволил определить напряжение разрушения всех таблеток, то есть часть таблеток не были разрушены.

При изучении фотографий, полученных на электронном микроскопе, обнаружено, что с уменьшением размера с 350 до 100 мкм частиц порошка диаметр пятна контакта уменьшается незначительно с  $75 \pm 15$  до  $50 \pm 15$  мкм. В то же время количество связей между частицами значительно возрастает (рисунок 2.12).

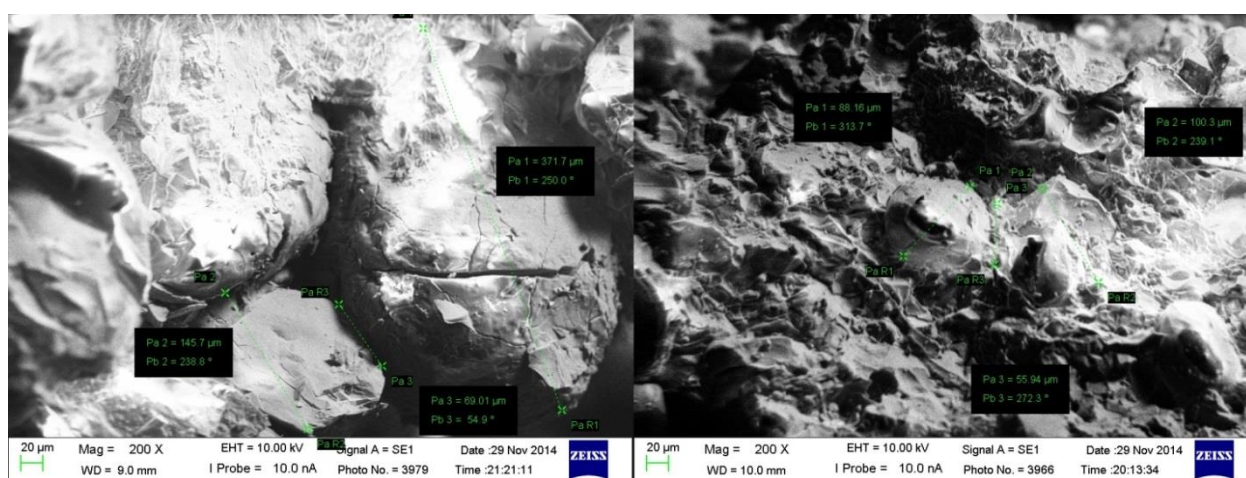


Рисунок 2.12 - Оценка величины размеров частиц и диаметра пятна контакта для фракции средним диаметром 355 мкм (слева) и 100 мкм

Таким образом, использование мелкодисперсных частиц значительно ускоряет процесс спекания, позволяет получать порошковые материалы с высокими значениями прочности. В диапазоне фракций от 350 до 140 мкм насыпная плотность уменьшается с 1,919 до 1,779 кг/м<sup>3</sup> соответственно. Величина усадки увеличивается с 0,47 до 1,16 мм, что составляет от 3,5 до 14,3% уменьшения объема формы. Средняя скорость усадки за период выдержки максимальной температуры (40 мин) увеличилась с  $5,69 \cdot 10^{-3}$  до  $20,6 \cdot 10^{-3}$  мм/ч.

В результате проделанной работы по получению керамики на основе карбида бора, а также диоксида кремния методом одноосного горячего прессования были определены параметры процесса, при которых происходит активное уплотнение

порошкового вещества. Характерные температуры начала процесса спекания для исследованных порошков составляют: 1700-1750°C при давлении прессования 40 МПа для карбида бора и 1100-1150°C при давлении прессования 45 МПа для диоксида кремния. Для получения керамики из карбида бора с пористостью менее 2% необходимо производить прессование при температуре процесса 1900-1950°C и давлении выше 60МПа. При данных параметрах прессования были изготовлены образцы в форме таблеток из карбида бора с различным средним размером порошка. Показано, что с уменьшением среднего размера порошка карбида бора наблюдается рост модуля упругости при сжатии. Введение легирующих добавок диборида титана и кремния привело к снижению модуля сжатия.

### **3 Разработка алгоритма создания однородных 3D тетрагональных сеток в произвольных многосвязных объектах для численного анализа свойств материалов и конструкций**

Численное решение нестационарных задач механики деформируемого твердого тела основано на конечно-разностных соотношениях уравнений баланса массы, импульса и энергии, которые замыкаются уравнениями процесса и уравнениями состояния. Построение конечно-разностных соотношений опирается на логически связанные ячейки и узлы сетки в пространстве. Поэтому одним из важных этапов построения численного инструментария моделирования динамических процессов в сложных технических объектах является создание трехмерной сетки, покрывающей пространство без пропусков и перекрытий.

Пространственная триангуляция – наиболее универсальный метод построения расчетных сеток внутри многосвязных областей произвольной формы.

Следуя успешной методологии построения треугольных сеток для двумерного случая в многосвязных областях, изложенной в [3,4], проведем обобщение на пространственный случай. Тогда необходимо реализовать следующие этапы:

1. выполнить построение геометрических примитивов границы сложных многосвязных технических объектов;
2. провести выбор мажорирующего объема с последующим заполнением его узлами сетки;
3. осуществить импорт треугольной сетки на граничных поверхностях;
4. провести удаление узлов первоначальной сетки, не попадающих в заданный объем многосвязного объекта;
5. применить динамический метод к полученному набору как граничных, так и внутренних узлов для их расстановки в упорядоченную структуру;
6. провести триангуляцию пространственного набора узлов и выполнить формирование структуры логически связанной разностной сетки для численного решения динамических задач деформирования и разрушения;
7. оценить полученную пространственную сетку по критериям качества.

Не вдаваясь в подробности по всем пунктам, рассмотрим динамический метод [5]. Поскольку счетная область - многосвязный пространственный объект, заполнен первичной сеткой, то остается применить динамический метод к полученному набору как граничных, так и внутренних узлов для их расстановки в упорядоченную структуру. Физическая основа динамического метода – взаимодействие близких узлов (частиц). Поэтому вид силы выбирается так, чтобы вся система частиц в равновесии обеспечивала плотную упаковку, или касание (малое перекрытие) сфер влияния узлов. Размер ячейки определяется расстоянием между центрами смежных узлов-частиц. Форма силы взаимодействия должна быть финишной в пространстве, т.е. сила отталкивания (притяжения) действует, когда два узла находятся на расстоянии ближе (дальше), чем равновесное расстояние. При удалении на значительные расстояния друг от друга узлы перестают взаимодействовать. Форма сила межчастичного взаимодействия  $f(r)$  выбрана подобно силе Ван-Дер-Ваальса (рисунок 3.1). Заметим, что при таком виде межчастичной силы все «плохие» элементы физически неустойчивы, и потому шанс создания таких «плохих» элементов значительно снижен.

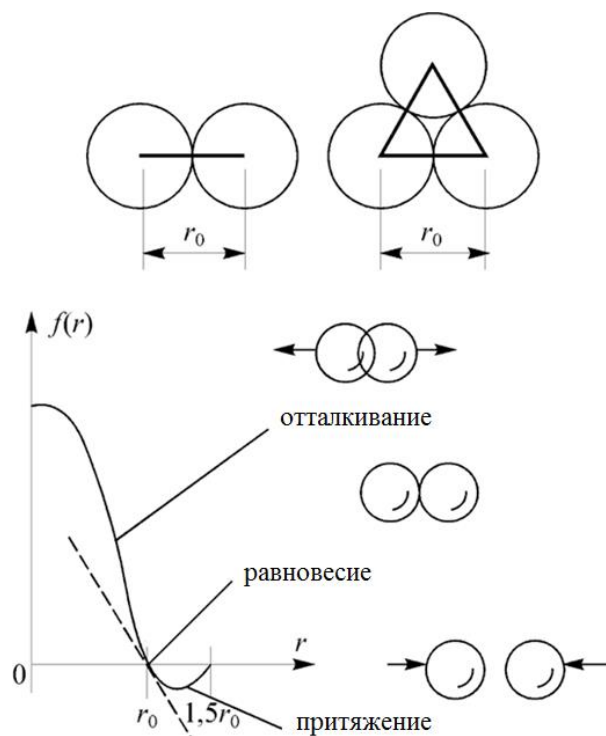


Рисунок 3.1 - Установление связей между центрами частиц и вид силы взаимодействия частиц

По начальным данным расположения частиц проводится интегрирование дифференциально-разностного уравнения по времени, пока система не достигнет равновесия. Математическая формулировка уравнения движения  $i$ -го узла в векторной форме имеет вид

$$m_i \frac{d^2 \bar{x}_i(t)}{dt^2} + \mathbf{K}_i \frac{d \bar{x}_i(t)}{dt} = \bar{f}_i(t), \quad (5.1)$$

где  $\bar{x}_i$  - положение  $i$ -го узла-частицы в счетной области;  $m_i$  - масса узла-частицы;

$\mathbf{K}_i$  - коэффициент демпфирования;  $\bar{f}_i = \sum_{j=1}^{j=N} \bar{f}_{ij}$  - сила, действующая на  $i$ -узел;  $N$  -

число соседей  $i$ -й частицы;  $\bar{f}_{ij} = \bar{f}(r_{ij})$  - вектор силы взаимодействия между узлами  $i$  и  $j$ ;  $r_{ij} = ((x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2)^{1/2}$  - расстояние между узлами  $i$  и  $j$ .

Решая полученную диссипативную задачу на установление, получим некоторую систему узлов, пришедших к равновесному состоянию. Для успешного решения пространственной задачи необходимо подходить очень ответственно к выбору силы взаимодействия между узлами. Если в плоском случае возможно использование одночастичного потенциала взаимодействия типа Леннарда-Джонса, то в пространственном случае необходимо использовать многочастичный потенциал, для обеспечения логической связи (сохранения углов) между соседними узлами сетки, во время движения узлов сетки. Так как мы не подобрали силу взаимодействия, обеспечивающую получения геометрической формы идеального тетраэдра, логическую связь на узлы сетки накладываем с помощью триангуляции Делоне.

Завершающим этапом работы становится этап глобальной оптимизации сетки. Необходимость данной процедуры объясняется возможными упрощениями алгоритма генерации или же неоднозначностью базового критерия качества. Так, например, в тетраэдризации, отвечающей критерию Делоне, возможно присутствие вырожденных тетраэдров, вершины которых находятся на поверхности одной сферы

вблизи ее экватора. Основной метод оптимизации состоит в локальной ретриангуляции многогранников, построенных на одной из фиксированных комбинаций сеточных элементов. В двумерном случае это выбор одного из двух вариантов триангуляции четырехугольника, построенного на двух треугольниках с общим ребром. В трехмерном случае речь, как правило, идет о декомпозиции шестигранника (см. рисунок 3.2) или восьмигранника, но возможны и более сложные варианты (см. рисунок 3.3). Основное отличие построенных по этому принципу алгоритмов состоит в формализации процедуры перестроения и критериях оценки альтернативных вариантов декомпозиции. Так, например, в широко известной работе [6], базовым сеточным примитивом считается треугольная грань. Грань остается в сетке, если ни одно из фиксированных преобразований содержащих ее многогранников не улучшает минимальное значение критериев качества соответствующей комбинации тетраэдров.



а) декомпозиция на два тетраэдра

б) декомпозиция на три тетраэдра

Рисунок 3.2 - Варианты декомпозиции шестигранника

Другой метод повышения качества сетки – локальные преобразования [7,8]. На каждом шаге алгоритма рассматриваются все тетраэдры по очереди, преобразования производятся в тех случаях, когда это выгодно, процесс повторяется до тех пор, пока не будет выполнено условие остановки алгоритма. Достоинство метода состоит в том, что на каждом шаге качество сетки монотонно улучшается,

т.к. мы производим преобразование только в том случае, когда оно повышает качество. Это же и его недостаток: метод может «застрять» в локальном оптимуме и не приблизиться к глобально оптимальной сетке.

Для всей сетки используется упорядоченный набор качеств всех тетраэдров, наборы сравниваются лексикографически (это означает, что из двух сеток лучше та, у которой лучше качество самого худшего тетраэдра, если качества худших тетраэдров у двух сеток одинаковые, то сравниваются вторые с конца по качеству и т.д.). На практике, нам никогда не требуется строить упорядоченный массив качеств всех тетраэдров.

В своей реализации мы применяем 3 вида преобразований: удаление ребра; удаление нескольких граней; и сглаживание.

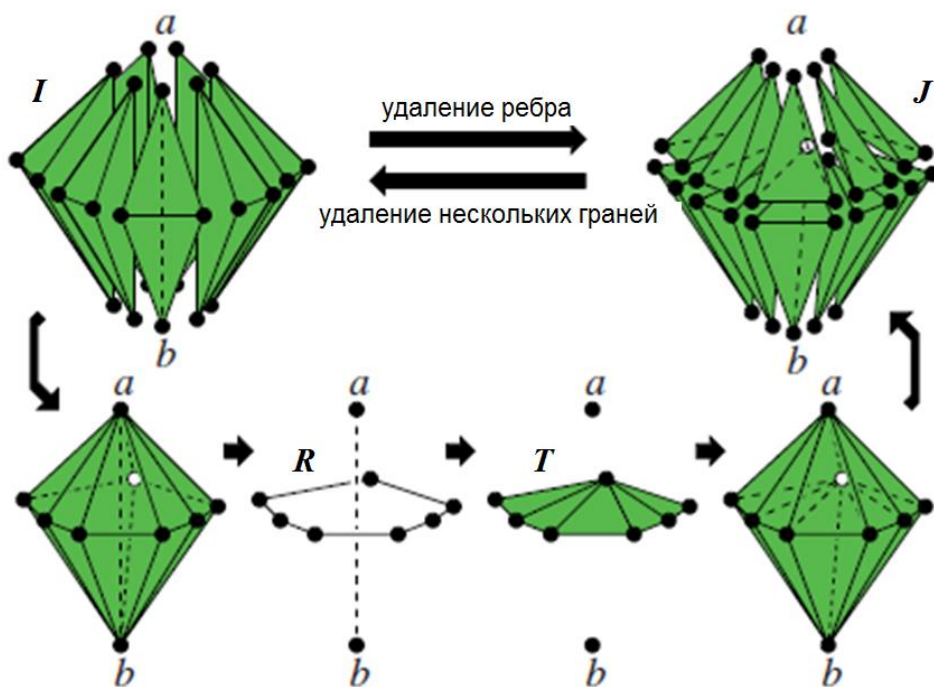


Рисунок 3.3 - Удаление ребра и удаление нескольких граней

Удаление ребра состоит в следующем, рисунок 3.3. Пусть  $ab$  – некоторое внутреннее ребро в сетке. В каждом тетраэдре, содержащем  $ab$ , есть ребро, противоположное  $ab$ . Пусть  $T$  – объединение этих ребер, тогда  $T$  – многоугольник (не обязательно плоский). Разбиение  $T$  на треугольники дает новый набор

тетраэдров, который заменяет все тетраэдры, ранее содержавшие ребро **ab**. Такая замена производится, только если худшее качество среди новых тетраэдров выше, чем худшее среди старых, поэтому общее качество сетки должно только увеличиваться. При удалении ребра мы перебираем возможные триангуляции **T**, и выбираем ту, которая дает наибольший рост худшего качества.

Удаление нескольких граней – операция, обратная к удалению ребра. Будем говорить, что грань **f** зажата между вершинами **a** и **b**, если сетка включает в себя тетраэдр, содержащий **f** и **a**, и тетраэдр, содержащий **f** и **b** (вершины **a** и **b** не принадлежат грани **f**). Пусть **M** – некоторый связный набор граней, зажатых между **a** и **b**, а **T** – его граница. Мы можем заменить набор тетраэдров, содержащих грани из **M**, на тетраэдры, включающие ребро **ab** и ребро из **T**. Это и есть удаление нескольких граней. Опять же, операция производится, только если она дает рост качества, а набор **M** выбирается самый выгодный среди возможных.

Операция сглаживания состоит в изменении положения одной внутренней вершины, так, чтобы максимально повысить наихудшее качество среди всех тетраэдров, включающих эту вершину. Целевая функция – минимум качества тетраэдров, не является гладкой, однако в статье [8] был предложен вариант метода градиентного спуска, подходящий для нахождения оптимального положения точки, который и используется с незначительными изменениями.

В статье [7] подробно обсуждаются различные алгоритмы выбора порядка применения операций. Мы используем простейший алгоритм – на каждом шаге рассматриваются все тетраэдры с качеством ниже некоторой константы. Сначала мы сглаживаем все вершины таких тетраэдров, потом для каждого из них пытаемся удалить ребро или грань, далее опять сглаживаем и т.д. Цикл продолжается до тех пор, пока максимальная разница в качестве до и после одного шага не станет достаточно малой.

Качество отдельного сеточного элемента (ячейки) принято оценивать путем вычисления характеристического параметра **Q**, значение которого зависит от формы тетраэдра, и последующего сравнения результата со значением аналогичного параметра у правильного тетраэдра.



Для единообразия значение критерия качества преобразуют так, чтобы нормированная величина  $Q$  находилась на интервале  $Q \in (0, 1]$ , при этом значение  $Q=1$  соответствовало бы правильному тетраэдру. Нужно отметить, что общепринятые критерии оценки качества тетраэдров лишь условно отражают степень близости к элементу правильной формы и не эквивалентны между собой. Различные критерии оценки качества сетки представлены в работе [9]. Простейший пример качества – отношение радиуса описанной сферы к радиусу вписанной

$$\beta = \frac{R_c}{3R_i}$$

Для демонстрации работы автоматического генератора сетки представим результат генерации сетки для простейшей 3D фигуры – цилиндр (радиус – 1, длина – 5). На рисунке 3.4 показана 3D сетка этого цилиндра, и цветовое распределение в зависимости от отношения объемов тетраэдров. Как видно из рисунка, большинство тетраэдров имеют объем близкий к идеальному. Среднее качество сетки, построенного цилиндра равно 0.93, а качество худшего элемента сетки  $Q_{\min} = 0.73$ . По оси OX отложено качество в обратном порядке - от лучшего к худшему, по оси OY – число элементов.

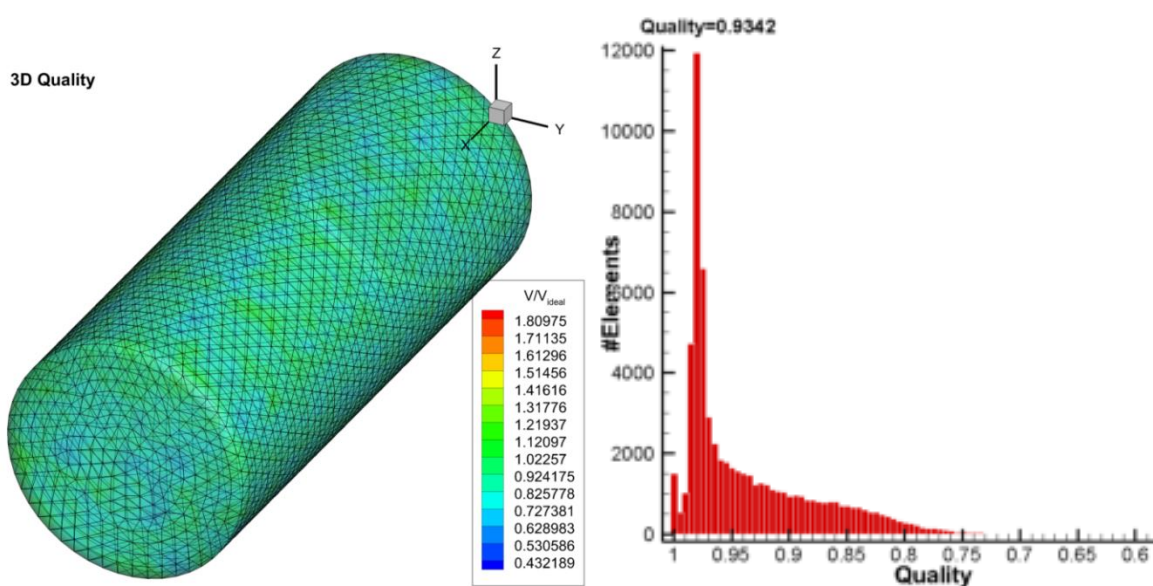


Рисунок 3.4 - Качество 3D сетки на примере цилиндра

Для сравнения предложенного генератора сетки с существующими аналогами рассмотрим сторонние проекты. В качестве первого примера рассмотрим проект SALOME, который использует для построения сетки свободно распространяемый генератор сеток NETGEN. NETGEN – это автоматический генератор сеток для двумерных и трехмерных областей. Программа генерирует тетраэдральные сетки в трехмерной области.

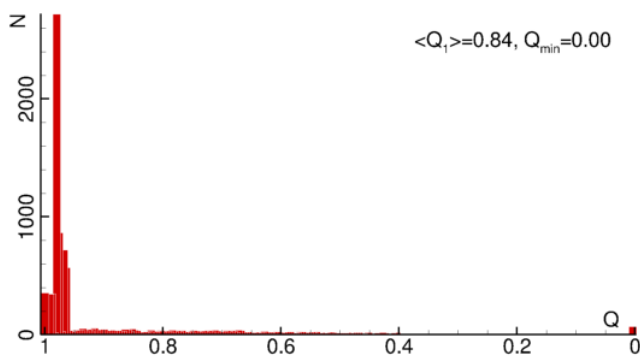


Рисунок 3.5 – NETGEN. Качество 3D тетраэдрной сетки

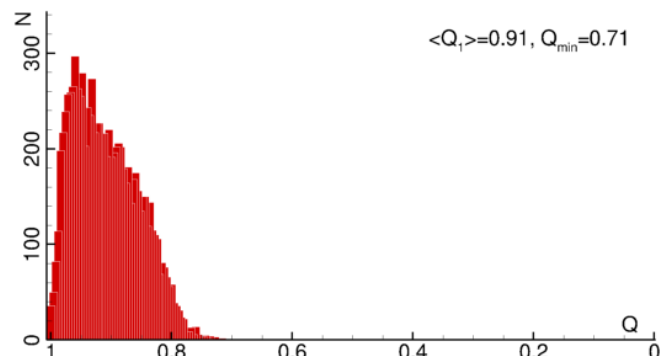


Рисунок 3.6 – NETGEN. Качество 3D тетраэдрной сетки после улучшения.

На рисунке 3.5 представлено изначальное качество построенной сетки в пакете SALOME. Гистограмма имеет явный линейчатый спектр в двух или трех зонах и большим разбросом ячеек с «плохим» качеством в зонах у границы, достигающим значений близких к нулю. Если среднее качество сетки приемлемое,  $\langle Q_1 \rangle$  – показывает 0.84, то качество “худшего” элемента  $Q_{\min}$  близко к нулю, что делает невозможным использование данной сетки для расчетов высокоскоростного нагружения твердых тел. Это означает, что генератор сетки создает большую часть тетраэдров близких к идеальным (порядка 90%), а остальные формируются “как есть” только с наложением логических связей на сетку в целом.

Результат работы алгоритмов, представленных выше и реализованных в программном комплексе, показан на рисунке 3.6. Применение динамического метода существенно расширяет множество качественных ячеек, при этом ячейки с низким качеством “исчезают”, так как в процессе динамической коррекции растет их качество. На рисунке видно, как повысилось среднее качество сетки с  $\langle Q_1 \rangle = 0.84$

до  $\langle Q_1 \rangle = 0.91$ . Применение локальной перестройки сетки, после динамического воздействия, существенно исправляет гистограмму, и худший элемент сетки имеет качество  $Q_{\min} = 0.71$ , вместо практически нулевого значения изначально.

В качестве второго примера демонстрации работы алгоритмов повышения качества и однородности разностной сетки – взят коммерческий пакет ANSYS, который использует для построения сетки встроенный генератор. На рисунке 3.7 представлено изначальное качество построенной сетки в ANSYS. Не смотря на то, что среднее качество по всем критериям ниже, чем в генераторе сеток SALOME, гистограмма качества не линейчатая, спектр стремится к нормальному распределению. Что очень важно – количество плохих ячеек мало, и встроенный генератор сетки не создает деградированных тетраэдров. Такую сетку уже можно использовать при моделировании высокоскоростного деформирования, но её качество можно значительно улучшить. На рисунке 3.8 представлен результат работы алгоритмов повышения качества. Из рисунка видно, что качество сетки  $\langle Q_1 \rangle$  существенно улучшается, центр спектра сместился в область более высоких значений качества, а качество “худшего” тетраэдра  $Q_{\min}$  повысилось более чем в 2 раза.

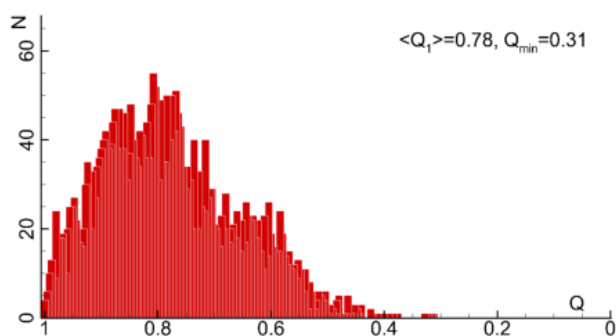


Рисунок 3.7 – ANSYS. Качество 3D тетраэдной сетки

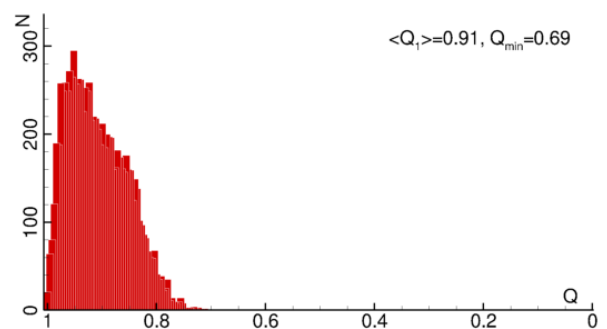


Рисунок 3.8 – ANSYS. Качество 3D тетраэдной сетки после улучшения

Если сравнивать результаты работы алгоритмов улучшения качества после SALOME и ANSYS, см. рисунки 3.6 и 3.8, то видно, что они дают примерно одинаковое качество. И это не удивительно, так как алгоритмы повышения качества,

разработанные в нашем программном комплексе, работают с любой тетраэдральной сеткой, и неизменной остаётся только граничная поверхностная сетка.

Анализируя представленные генераторы тетраэдральных сеток и анализ результатов их работы, можно сказать, что наибольшую перспективу в плане совершенствования алгоритмов пространственной триангуляции имеет направление по разработке эффективных методов генерации оптимального распределения сеточных узлов. К сожалению, в силу оптимизационного характера задачи пространственной триангуляции, а так же естественного влияния формы и шага дискретизации граничных поверхностей на свойства сеточных элементов, здесь нельзя в конечном итоге гарантировать полное отсутствие в сетке деформированных тетраэдров. Стабильно высокие характеристики должны иметь тетраэдры, расположенные в удаленных от границы триангулируемого многогранника областях.

#### **4 Численное моделирование компактирования пористых керамических порошков**

Компактирование керамических порошков с использованием динамических процессов широко изучалось с точки зрения изготовления керамик с уникальными свойствами и микроструктурами. В этих исследованиях были изучены эффекты влияния давления и температуры на свойства спекаемых керамик. В то же время, существует ограниченное количество работ, в которых исследуются процессы динамического уплотнения керамики в количественном выражении, а также исследуются физические процессы, связанные с затеканием пор. Кроме того, отсутствует понимание влияния скорости нагружения на процесс компактирования керамических порошков.

Ударное компактирование порошков и пористых материалов было изучено как для больших давлений с целью определения температурных аспектов поведения материалов [10], так и при более низких давлениях для развития моделей затекания пор. Литература по динамическому компактированию достаточно обширна: большое количество ссылок можно найти в двух обзорных статьях [10,11], а также в книгах [3,4,5]. Общей характеристикой исследований динамического нагружения высокопористых материалов являются существенные экспериментальные сложности, которые приводят к большим разбросам и неоднозначности экспериментальных данных.

Кроме экспериментального исследования динамического нагружения порошков создано много моделей для описания динамического поведения пористых материалов и порошков при компактировании. Наиболее широко используемой является модель Херрманна [15]. Несмотря на простоту и, в значительной степени эмпирический характер, эта модель отражает многие особенности при динамическом воздействии на уплотняемые материалы. Эта модель хороша тем, что для ее замыкания требуется небольшое количество констант материала, которые легко можно найти или оценить. Относительно недавно эта модель была обобщена для описания компактирования смеси нескольких фаз [16].

Альтернативным подходом к моделированию является рассмотрение микромеханики пустот или схлопывания пор, в основе такого подхода лежит сферическая модель поры [17] и ее развитие [13,18,19], в которой анализируется механизм затекания или схлопывания одной поры для того, чтобы определить поведение порошка или пористой среды. Существенным ограничением этого класса моделей является то, что все работают в рамках упруго-пластического течения материала и не учитывают разрушение и трение между частицами. Тем не менее, в настоящее время степень влияния этих эффектов на компактирование керамических порошков не выяснена. В работах [20,21] приведен обзор моделей описания поведения керамических материалов при динамических нагрузках. Три из таких моделей следует особо отметить, а именно модель Холмквиста-Джонсона-Кука [22] и две модели Джонсона-Холмквиста [23,24]. Кроме того, было обнаружено, что аналогичное поведение материала может быть описано с использованием комбинации модели пластичности Друкера-Прагера и уравнением состояния [25]. Каждая из этих моделей содержит три основных элемента: уравнение состояния (УС) для описания зависимости давление – плотность, включающее в себя нелинейные эффекты уплотнения; поверхность текучести, описывающей зависимость прочности неповрежденного и разрушенного материала, зависящей от давления, и модель разрушения, описывающая переход материала из неповрежденного в разрушенное состояние.

Что касается применимости данных моделей к описанию динамического сжатия пористых керамических материалов, то в последнее время существует лишь ограниченное число работ, посвященных этой тематике. Отметим работу [26], в которой численно исследовалось компактирование карбида бора В4С в плоской постановке. В работах [27,28] приведены результаты конечно-элементного моделирования получения керамических сверхпроводников путем взрывного компактирования.

Запишем, согласно [19], систему уравнений деформирования пористого материала. Уравнения неразрывности, движения и энергии имеют вид:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_i \rho v_i &= 0, \quad \rho = \rho_s m_2, \quad m_1 + m_2 = 1, \\
\rho \frac{dv_i}{dt} &= \nabla_j \sigma_{ij}, \quad \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v_i \nabla_i, \quad \nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i}, \\
\rho \frac{dE}{dt} &= \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}, \quad \dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} (\nabla_i v_j + \nabla_j v_i), \\
\sigma_{ij} &= -P \delta_{ij} + S_{ij}, \\
m_1 &= \frac{4}{3} \pi a^3 n, \quad i, j = 1, 2, 3.
\end{aligned} \tag{4.1}$$

где  $a, n$  - радиус и концентрация пор;  $m_1$  - объемная концентрация пор (пористость);  $m_2$  - объемная концентрация материала;  $\rho$  - средняя плотность;  $\sigma_{ij}, \dot{\varepsilon}_{ij}$  - осредненные тензоры напряжений и скорости деформации;  $v_i$  -  $i$ -я компонента скорости;  $E$  - удельная внутренняя энергия;  $P$  - давление;  $S_{ij}$  - девиатор тензора напряжений.

Изменение величины  $\alpha(a_0, P, Y_s, t)$  описывается уравнением [17]

$$\begin{aligned}
P &= \frac{\rho_s a_0^2}{3(\alpha_0 - 1)^{2/3}} \left\{ \ddot{\alpha} \left[ \alpha^{-1/3} - (\alpha - 1)^{-1/3} \right] + \frac{\dot{\alpha}^2}{6} \left[ (\alpha - 1)^{-4/3} - \alpha^{-4/3} \right] \right\} - \\
&\quad - \frac{4\eta \dot{\alpha}}{3\alpha(\alpha - 1)} + \frac{2Y_s}{3} \ln \frac{\alpha}{\alpha - 1},
\end{aligned}$$

где  $\eta$  - вязкость материала,  $Y$  - предел текучести.

Для замыкания системы (4.1) используется разработанное выше (раздел 2) малопараметрическое уравнение состояния керамических материалов, которое позволяет провести расчеты ударно-волновых процессов с минимальным числом физических параметров в качестве начальных данных.

Согласно [24], напряженное состояние материала имеет следующий вид

$$\sigma^* = \sigma_i^* - D(\sigma_i^* - \sigma_f^*),$$

где  $\sigma_i^*$  нормированное эквивалентное напряжение неповрежденного материала,  $\sigma_f^*$  нормированное эквивалентное напряжение поврежденного материала,  $D$  является переменной повреждаемости. Нормированные эквивалентные напряжения  $\sigma^*, \sigma_i^*, \sigma_f^*$  имеют общий вид  $\sigma^* = \sigma / \sigma_{HEL}$ , где  $\sigma$  является фактическим эквивалентным напряжением фон Мизеса, а  $\sigma_{HEL}$  является эквивалентным напряжением на пределе упругости Гюгонио (HEL), при котором одномерная (при одноосном напряженном состоянии) ударная волна превышает предел упругости материала.

Нормированные эквивалентные напряжения неповрежденного и поврежденного материала записываются как функция давления и скорости деформации

$$\sigma_i^* = A(P^* + T^*)^n (1 + C \ln \dot{\varepsilon}^*),$$

$$\sigma_f^* = B(P^*)^m (1 + C \ln \dot{\varepsilon}^*),$$

где постоянные  $A, B, C, m, n$ , зависящие от свойств материала, определяются на основе экспериментальных данных. Нормированное давление определяется как  $P^* = P / P_{HEL}$ , где  $P$  это фактическое давление,  $P_{HEL}$  это давление на пределе упругости Гюгонио. Точно так же определяются нормированное максимальное растягивающее гидростатическое давление  $T^* = T / P_{HEL}$ , где  $T$  является максимальным растягивающим давлением. Скорость деформации учитывается с помощью модели Джонсона-Кука [29]. Эффективная скорость пластической деформации определяется соотношением

$$\dot{\varepsilon}^* = \frac{\overline{\varepsilon}^p}{\varepsilon_0},$$

где  $\dot{\varepsilon}_0 = 1 \text{ c}^{-1}$  - единичная скорость деформации. Пластическое течение предполагается с использованием поверхности текучести Мизеса.



Степень разрушения материала предполагается накапливать путем увеличения пластической деформации керамики на величину  $\Delta \varepsilon^p$ , используя выражение, аналогичное модели разрушения Джонсона-Кука [30]

$$D = \sum \frac{\Delta \varepsilon^p}{\varepsilon_f^p},$$

$$\varepsilon_f^p = D_1 (P^* + T^*)^{D_2},$$

где  $D_1, D_2$  - постоянные, зависящие от свойств материала, определяемые на основе экспериментальных данных. Материал разрушается, когда значение  $D$  становится равным или больше 1.

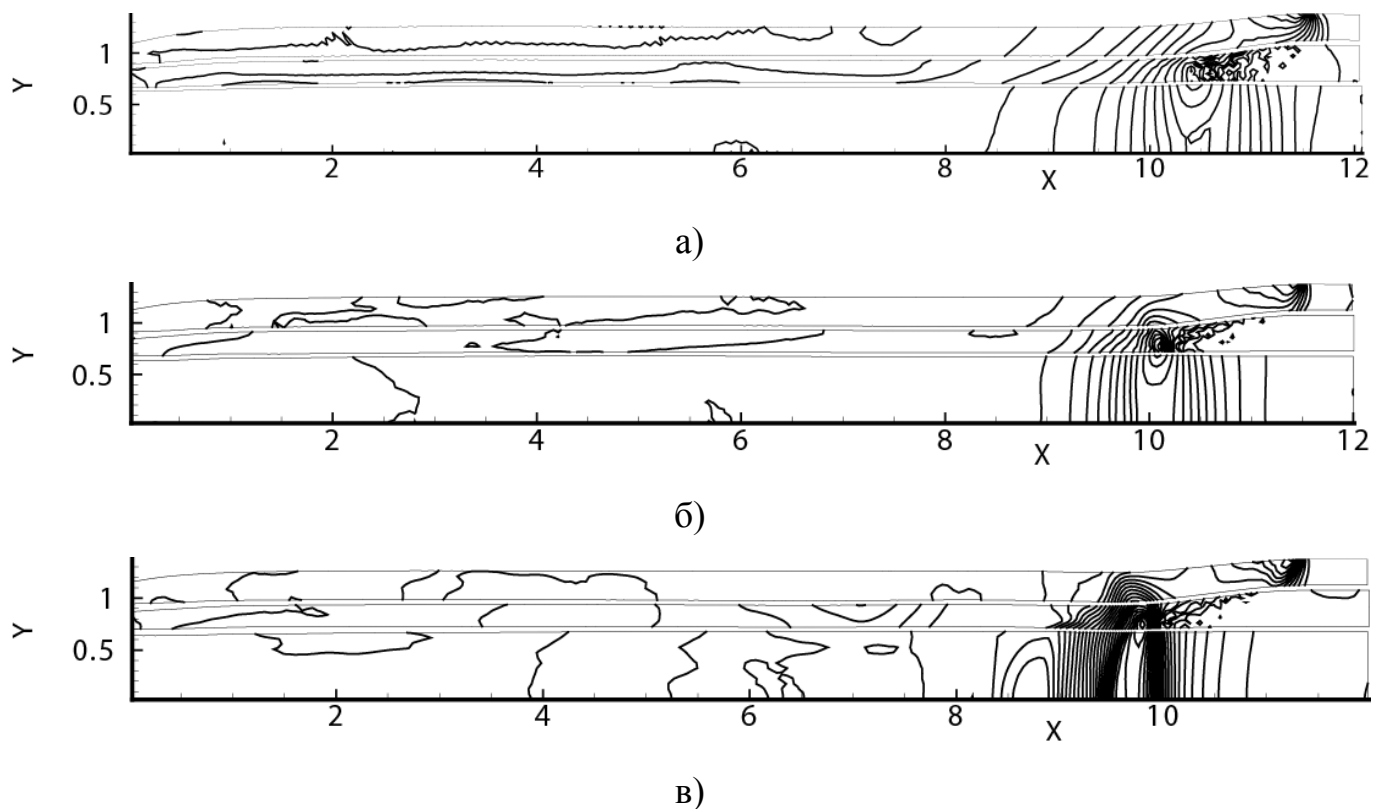


Рисунок 4.1 - Изолинии давления. а)  $D = 3,4$  км/с; б)  $D = 4,6$  км/с; в)  $D = 5,4$  км/с;

Проведено численное моделирование распространения ударных волн и деформирования экспериментальной сборки при взрывном компактировании

керамического порошка на примере карбида бора. На рисунке 4.1 показано распределение изолиний давления по толщине исследуемых образцов для трех режимов нагружения. Анализ показывает, что при скорости детонации  $D = 3,4$  км/с не происходит достаточного сжатия в проходящей ударной волне, что согласуется с экспериментальными данными. Образец №1 (рисунок. 4.1, в) подвержен воздействию существенно большего давления, приводящего к образованию «маховской» конфигурации на границе порошок-центральный стержень. Образование такой конфигурации приводит к разрушению готового компакта вблизи границы с центральным стержнем. Режим компактирования со скоростью  $D = 4,6$  км/с является, по всей видимости, оптимальным. Это подтверждается результатами экспериментов и полученными в расчетах распределениями параметров по толщине скомпактированных образцов.

## **5 Создание комплекса программ в рамках метода молекулярной динамики для расчета усталостного разрушения под действием внешнего циклического напряжения и скорости в наноразмерных материалах повышенной прочности**

Настоящая работа направлена на решение фундаментальной научной проблемы появления усталостных повреждений металлов и сплавов в результате внешних циклических нагрузок.

Актуальность проблемы создания физико-математической модели усталостных повреждений и разрушений металлов и исследования влияния начальных и внешних условий на их свойства на наномасштабном уровне связана с предупреждением техногенных катастроф, к которым приводит усталостное разрушение материалов. Необходимость таких исследований обусловлена отсутствием на данный момент времени необходимой экспериментальной базы для проведения динамических исследований накопления разрушений. Модели, основанные на континуальной теории, не дают и не могут дать информацию о физических процессах на атомарном уровне, происходящих при циклическом нагружении материала. Дорогостоящие экспериментальные исследования также связаны со значительными трудностями, вызванными, в первую очередь, масштабами явления, как во времени, так и в пространстве. Все вышеприведенные причины и обусловили необходимость применения метода молекулярной динамики, который, в силу своего пространственно-временного масштаба, дает уникальную возможность разработки физико-математической модели развития усталостных повреждений в твердых телах. Результаты данной работы дали объяснение процессу циклического разрушения на разных масштабных уровнях, в том числе и на атомарном. Таким образом, построена связь между процессами, происходящими на макроуровне, с процессами, возникающими при циклической нагрузке на атомарном уровне.

Для решения фундаментальной проблемы, поставленной выше, решалась конкретная задача – детализированное исследование динамических процессов на

микроуровне, которые приводят к возникновению дефектов и дальнейшему разрушению металлической наноструктуры под влиянием внешних циклических нагрузок.

В настоящее время в мировой науке отсутствует теория поглощения энергии структурой на микроуровне из внешнего энергетического потока (циклическая нагрузка) и трактовка перехода повреждений от микро- к мезомасштабному уровню. К отличиям и преимуществам данного исследования от работ других научных коллективов [31–41], можно отнести то, что проделан подробный анализ влияния системы поверхностных атомов на процессы повреждения и разрушения при циклическом нагружении. Кроме того, проведено исследование распределения энергетических и механических характеристик по всей длине кристалла, распространение волн возмущения с помощью методики анализа всего образца по подсистемам. В данном проекте разбиение на подсистемы проводилось согласно геометрии структуры, характеру и направлению внешнего воздействия, в результате чего получено распределение всех необходимых механических и энергетических параметров по длине кристалла в нужные для анализа состояния системы моменты времени.

Основной задачей являлось создание комплекса программ в рамках метода молекулярной динамики для расчета усталостного разрушения под действием внешнего циклического напряжения и скорости в материалах повышенной прочности. При этом предполагалось проведение исследований для материалов, для которых имеются хорошо апробированные потенциалы межатомного взаимодействия. После создания комплекса программ было проведено их тестирование для исследования влияния внешнего одноосного циклического напряжения и получены первые результаты, которые представлены ниже.

## **5.1 Физическая модель**

Исследования проводились на металлических твердотельных структурах. На первом этапе использовались наноструктуры с идеальной кристаллической

решеткой, имеющие форму прямоугольных параллелепипедов при начальных криогенных температурах.

Одна из граней структуры закреплялась в неподвижном зажиме, а к противоположной прикладывалась внешняя нагрузка. Боковые грани оставались свободными, что позволило решать сопряженную задачу влияния свободных поверхностей на усталостные процессы.

Исследовано два типа циклической нагрузки:

– Внешнее синусоидальное напряжение, действующее соосно с образующей параллелепипеда (ось  $X$ ), и перпендикулярно ей (плоскость  $YZ$ ) (изгибные нагрузки);

– Движение подвижного зажима с заданной синусоидальной скоростью (соосно образующей параллелепипеда, и перпендикулярно ей).

## 5.2 Импульсное постоянное внешнее напряжение

На первом этапе проведем анализ процессов в структуре под действием постоянного растягивающего напряжения, приложенного к наностержню в момент  $t = 0$ . Зависимость нарастания нагрузки при этом описывается функцией Хэвисайда. На рисунке 5.1 приведена зависимость относительного удлинения стержня от времени. Исследование периода колебаний дает значение 27,28 пс.

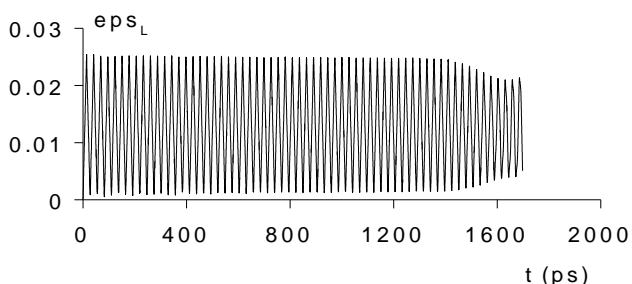


Рисунок 5.1 - Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Внешнее растягивающее напряжение 1 ГПа

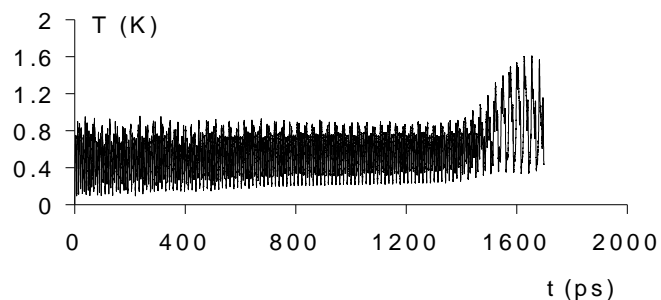


Рисунок 5.2 - Зависимость температуры стержня от времени. Внешнее растягивающее напряжение 1 ГПа

При этом значение температуры остается практически постоянным до 1500 пс, т.е. поглощение энергии на этом интервале практически не происходит (рисунок 5.2). Эти характеристики практически не зависят от величины приложенного напряжения. Так, на рисунке 5.3 представлена зависимость относительного удлинения стержня от времени для внешнего постоянного напряжения 1,5 ГПа. При этом, период колебаний равен 26,56 пс, т.е. практически совпадает с предыдущим результатом.

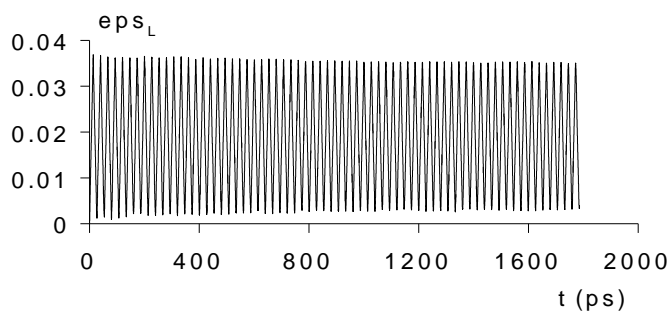


Рисунок 5.3 Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Внешнее растягивающее напряжение 1,5 ГПа

Проанализируем действие постоянного сжимающего напряжения 1 ГПа (рисунок 5.4). Зависимость нарастания нагрузки при этом так же описывается функцией Хэвисайда.

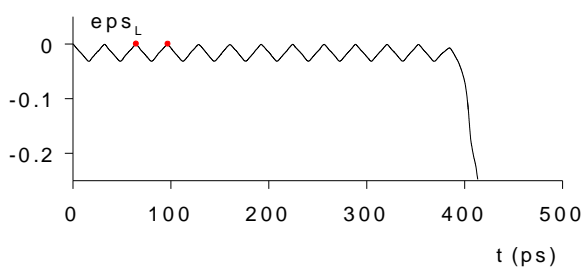


Рисунок 5.4 - Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа

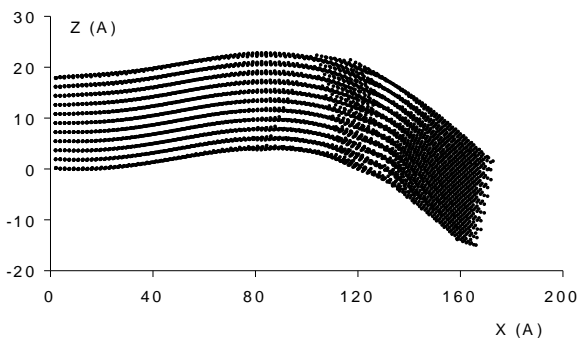


Рисунок 5.5 - Расположение атомов структуры в момент 400 пс в плоскости XZ. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа

Примерно до 400 пс наблюдается колебательный режим с периодом колебаний стержня 32,32 пс, что несколько больше случая растяжения таким же напряжением. Однако, после 400 пс при сжатии наблюдается разрушение стержня. Внешний вид структуры в момент разрушения приведен на рисунке у5.5. Процесс разрушения был вызван потерей устойчивости стержня. Смещение атомных плоскостей вызвало сильное поглощение энергии и накопление ее в виде тепловой составляющей (рисунок 5.6). При этом наблюдается так же и рост потенциальной энергии межатомного взаимодействия системы (рисунок 5.7).

Для лучшей иллюстрации критического перехода к новому состоянию на рисунке 5.8 приведен внешний вид структуры после разрушения. Фактически во всей структуре произошел переход к аморфному состоянию, или от идеальной кристаллической решетки к трансляционным дефектам.

В качестве иллюстрации влияния величины сжимающего напряжения приведем зависимость относительного удлинения стержня от времени для сжимающего напряжения 1,5 ГПа. (рисунок 5.9).

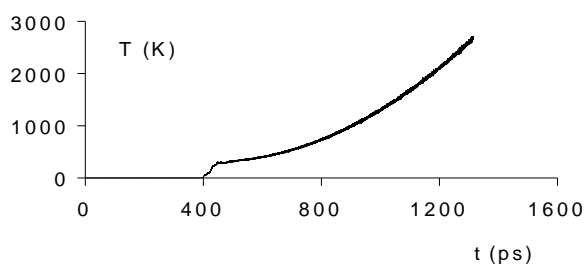


Рисунок 5.6 - Зависимость температуры стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа

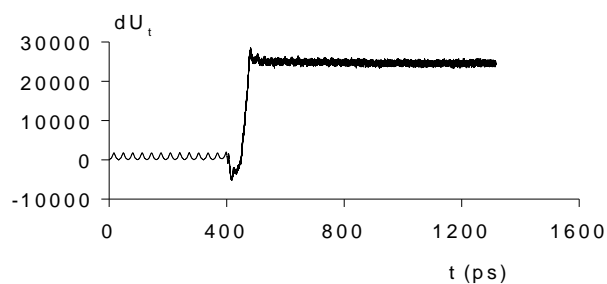


Рисунок 5.7 - Зависимость изменения потенциальной энергии взаимодействия атомов стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа

На первом этапе, продолжительность которого около 300 пс, наблюдаются колебания с периодом около 35,6 пс, что довольно близко к случаю сжимающего напряжения в 1 ГПа. Процесс идет аналогично случаю внешнего напряжения,

однако система принимает каплеобразную форму, в которой атомы находятся в аморфном состоянии (рисунок 5.10) и система перестает нагреваться (рисунок 5.11).

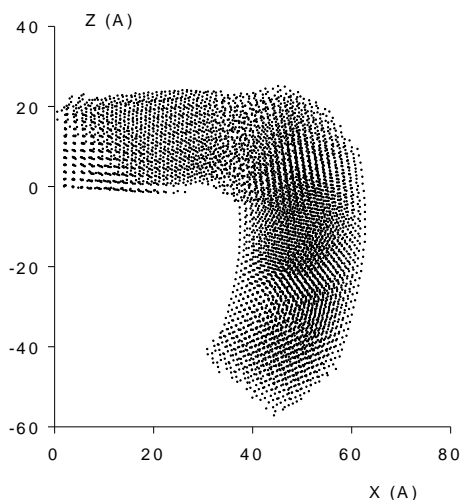


Рисунок 5.8 - Расположение атомов структуры в момент 440 пс. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа

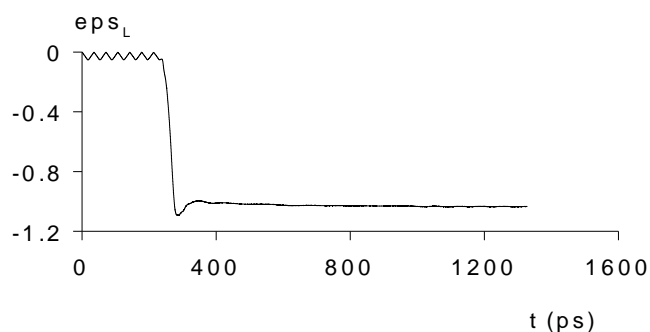


Рисунок 5.9 - Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1,5 ГПа

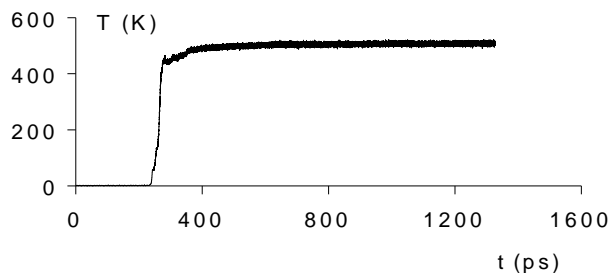


Рисунок 5.10 - Зависимость температуры стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1,5 ГПа

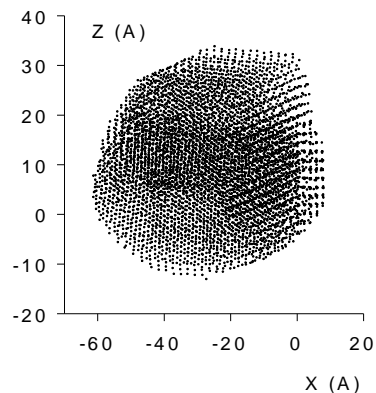


Рисунок 5.11 - Расположение атомов структуры в момент 400 пс. Внешнее сжимающее напряжение 1,5 ГПа

Представляет интерес определение величины постоянного растягивающего напряжения, форма которого также описывается функцией Хэвисайда, при котором происходит разрушение. Как показали численные расчеты, разрушение в этом случае происходит при нагрузках 5 ГПа. На рисунке 5.12 приведена зависимость



относительного удлинения стержня от времени для внешнего растягивающего напряжения 4 ГПа, при котором разрушение еще не происходит. Наблюдаются гармонические колебания с периодом колебаний около 25 пс и амплитудой порядка 9%.

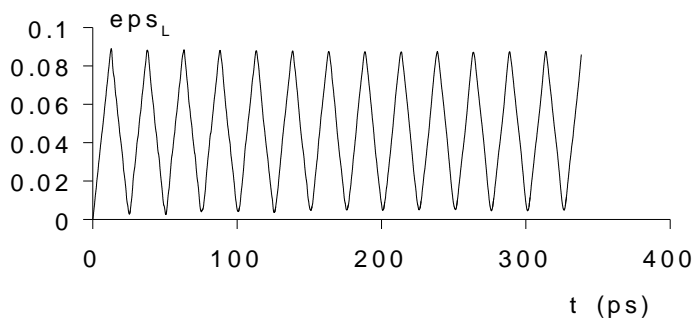


Рисунок 5.12 - Зависимость относительного удлинения стержня от времени.

Внешнее растягивающее напряжение 4 ГПа

### 5.3 Постоянное внешнее напряжение, нарастающее квазистатически

На следующем этапе приведем иллюстрацию для случая линейного нарастания внешнего напряжения на интервале от 10 до 80 пс.

Для случая адиабатического возрастания внешнего **растягивающего** напряжения на рисунок 5.13 приведена зависимость относительного удлинения стержня от времени. Видно, что с увеличением интервала нарастания напряжения от 10 пс до 80 пс амплитуда осцилляций относительного удлинения стержня уменьшаются примерно в 20 раз.

Для иллюстрации поведения системы по отношению к поглощению энергии на рисунке 5.14 представлена зависимость температуры от времени для различных интервалов роста внешнего напряжения. Видно, что при увеличении интервала от 10 пс до 50 пс температура падает примерно на два порядка.

Посмотрим, что дает квазистатическое включение **внешнего сжимающего напряжения**. На рисунке 5.15 для этого варианта представлена зависимость относительного удлинения стержня от времени.

Как видно, увеличение времени нарастания сжимающего напряжения приводит к небольшому увеличению времени до разрушения, и снижению

амплитуды колебаний примерно в 10 раз. При этом период колебаний меняется очень слабо (в пределах 10% относительно случая постоянного сжимающего напряжения). На рисунке 5.16 приведен внешний вид структуры в момент времени 500 пс. Видно, что переход от гармонических колебаний относительного удлинения наностержня к хаотическому – синхронен, с разрушением структуры.

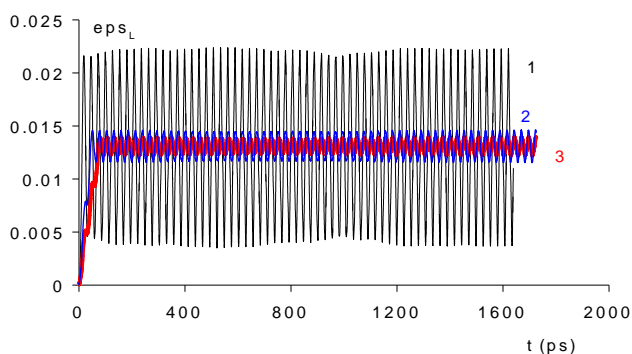


Рисунок 5.13 - Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Внешнее растягивающее напряжение 1 ГПа. Интервалы нарастания напряжения: 1 – 10 пс, 2 – 50 пс, 3 – 80 пс

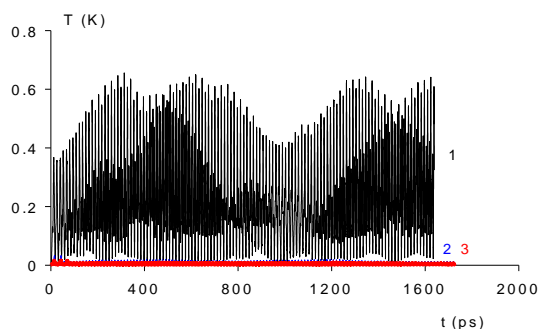


Рисунок 5.14 - Зависимость температуры стержня от времени. Внешнее растягивающее напряжение 1 ГПа. Интервалы нарастания напряжения: 1 – 10 пс, 2 – 50 пс, 3 – 80 пс

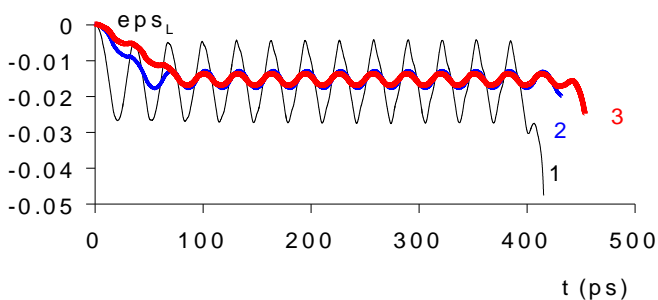


Рисунок 5.15 - Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа. Интервалы нарастания напряжения: 1 – 10 пс, 2 – 50 пс, 3 – 80 пс

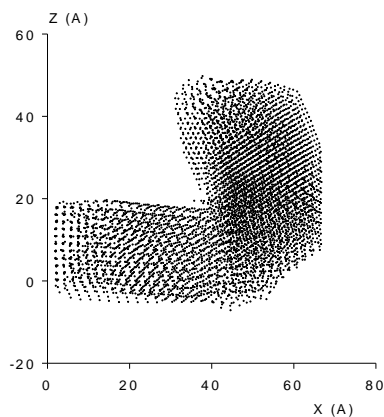


Рисунок 5.16 - Расположение атомов структуры в момент 500 пс. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа, период нарастания напряжения 80 пс

## 5.4. Гармоническое внешнее напряжение

Наибольший интерес в теории усталостного разрушения представляет внешнее напряжение, зависящее от времени по гармоническому закону. Для сравнения влияния временной зависимости внешнего напряжения на процессы в наноструктурах ниже приведена иллюстрация для случая  $\sigma = \sigma_0 \sin(\omega t)$  с амплитудой  $\sigma_0 = 1$  ГПа. Частота колебаний выбрана в соответствии с периодом собственных колебаний, найденном выше, для случая воздействия постоянным внешним напряжением, и равна  $0.25 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$ . На рисунке 5.17 приведена зависимость относительного удлинения стержня от времени для амплитуды внешнего напряжения 1 ГПа, частоты 0.25 ТГц. На рисунке 5.18 видим рост температуры от времени (параметры внешней нагрузки те же).

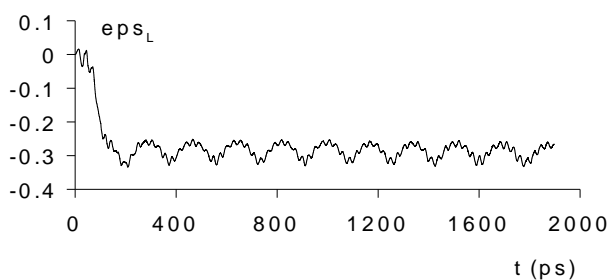


Рисунок 5.17 - Зависимость относительного удлинения стержня от времени. Амплитуда внешнего напряжения 1 ГПа, частота 0,23 ТГц

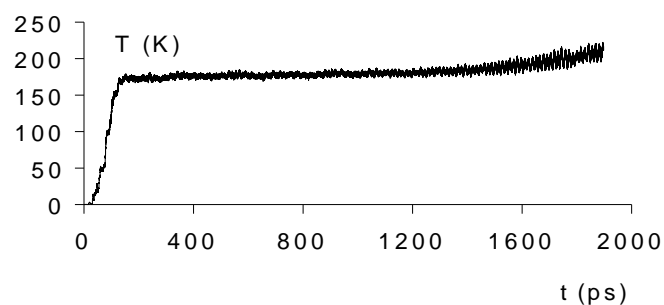


Рисунок 5.18 - Зависимость температуры стержня от времени. Амплитуда внешнего напряжения 1 ГПа, частота 0,23 ТГц

На рисунках 5.19-5.21 приведен внешний вид наноструктуры в разные моменты времени внешнего воздействия.

На рисунке 5.22 показаны пики температуры наноструктуры при действии внешнего синусоидального одноосного напряжения в зависимости от периода колебаний. Таким образом, выявлены резонансные частоты для некоторых амплитуд внешней нагрузки. Таким образом, можно сделать вывод, что существуют частоты,

на которых наблюдается повышенное резонансное поглощение внешней энергии. Результаты собраны в таблице 5.1.

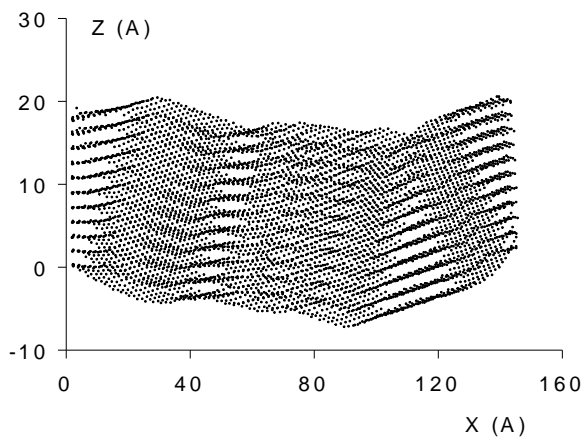


Рисунок 5.19 - Расположение атомов структуры в момент 100 пс. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа, частота 0,25 ТГц, момент времени 100 пс

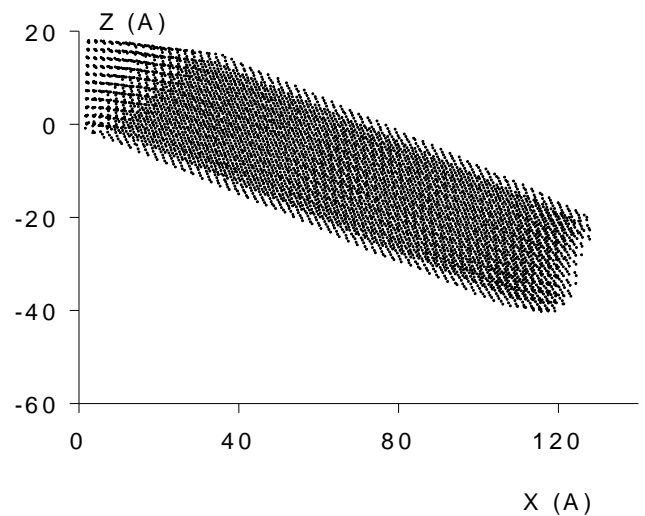


Рисунок 5.20 - Расположение атомов структуры в момент 100 пс. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа, частота 0,25 ТГц, момент времени 200 пс

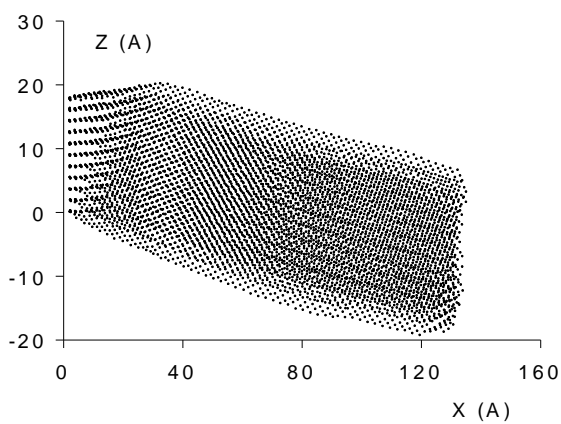


Рисунок 5.21 - Расположение атомов структуры в момент 100 пс. Внешнее сжимающее напряжение 1 ГПа, частота 0.25 ТГц, момент времени 1,5 нс

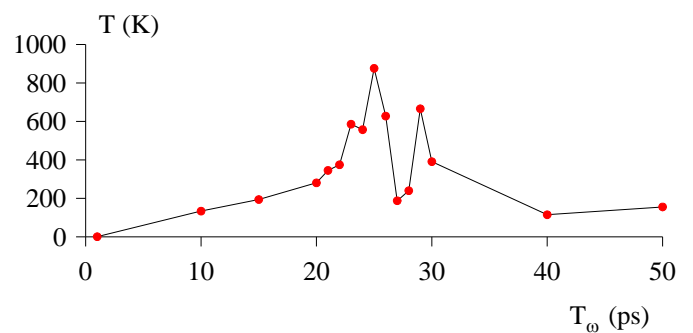


Рисунок 5.22 - Зависимость температуры структуры от периода колебаний внешней нагрузки (пс). Амплитуда напряжения 1 ГПа, момент времени 1,5 нс

Таблица 5.1

$\sigma$ , ГПа	$\omega$ , ТГц
0.01	0.209; 0.419;
0.5	0.209; 0.628;
0.7	0.251; 0.628;
1.	0.217; 0.251

1. Форма импульса при включении внешнего напряжения на подвижном зажиме наностержня, оказывает сильное влияние на дальнейшую эволюцию системы:

- растягивающее напряжение, описываемое функцией Хэвисайда, вызывает осцилляции относительного удлинения с амплитудой на порядок большей, чем в случае квазистатического включения;
- сжимающее напряжение, описываемое функцией Хэвисайда, вызывает более быстрое разрушение структуры по сравнению со случаем квазистатического включения;

2. Разрушение наноструктуры с идеальной кристаллической решеткой под воздействием внешнего сжимающего напряжения обусловлено потерей устойчивости. Критическое значение внешнего напряжения, при котором наступает разрушение, в этом случае в пять раз ниже, чем в случае растягивающего напряжения.

Для случая внешнего напряжения, зависящего от времени по гармоническому закону в интервале частот от 0,1 ТГц до 10 ТГц:

3. Разрушение не наблюдалось для тех же значений амплитуды, для которых в случае сжимающего напряжения наноструктура разрушалась.

4. В наноструктуре с идеальной кристаллической решеткой, формировались дефекты по типу потери устойчивости в атомных плоскостях.

5. Момент начала формирования дефектов в наноструктуре совпадает с началом поглощения внешней энергии и сильным ростом температуры.

6. Рассчитанный спектр поглощения энергии позволил выявить в исследуемом интервале частот резонансное поглощение на частотах, близких к собственным частотам колебаний, обусловленных постоянным приложенным напряжением.

Создание физико-математической модели усталостных повреждений и разрушений металлов на микроуровне, исследование влияния начальных и внешних условий на их свойства на наномасштабном уровне позволят закрыть пробел в науке об усталостном разрушении, обусловленный сложностями проведения эксперимента по динамическим исследованиям накопления разрушений на атомном масштабе.

## 6 Разработка и отладка комплекса программ для расчета механических характеристик наноразмерного метало-керамического образца при его растяжении с постоянной скоростью деформации

### 6.1 Металлические структуры

В качестве первоначального потенциала межатомного взаимодействия, был выбран формализм, основанный на модели погруженного атома – 2NN MEAM [42,43]. Однако, несмотря на обширную базу элементов для формализма 2NN MEAM, полученная программа оказалась чрезвычайно требовательна к вычислительным мощностям. В качестве альтернативы решено было использовать табулированные потенциалы базы данных Interatomic Potentials Repository Project (U.S. NIST, <http://www.ctcms.nist.gov/potentials/>), основанные на формализмах EAM [44,45] и FS (Finnis-Sinclair) [46].

В рамках настоящей работы была произведена модернизация имеющегося пакета программ для расчета сил на основе данных межатомных потенциалов. Для апробации программы были проведены расчеты для сплава  $Al_3Mg$  (структура  $L1_2$ ), параметры потенциала которого приведены в работе [47].

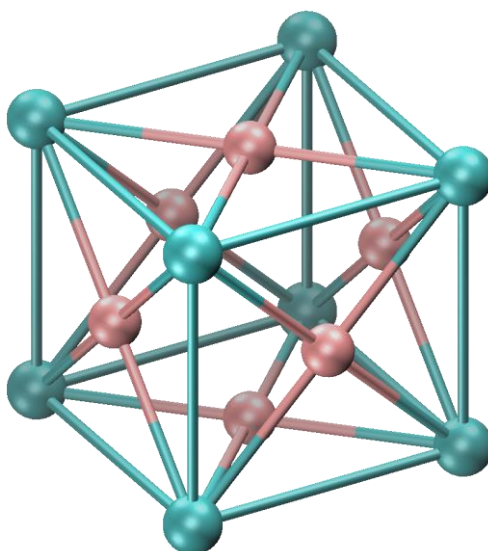


Рисунок 6.1 - Кристаллическая ячейка  $Al_3Mg$  ( $L1_2$ )



Начальные данные находились следующим образом. Из кристалла идеальной кристаллической структуры (рисунок 6.1) строился кластер кубической формы (длина ребра 40 ангстрем).

Так как полученные наноструктуры обладают чрезвычайно развитой поверхностью, то в результате построенный кластер не лежит в минимуме потенциальной энергии. Минимум потенциальной энергии системы находился с помощью метода искусственной вязкости [48]. На рисунке 6.2 приведены зависимости температуры и изменения потенциальной энергии от времени (в пикосекундах) в процессе охлаждения для нанокластера  $\text{Al}_3\text{Mg}$ . Как видно из графиков диссипативные силы корректно приводят систему к минимуму потенциальной энергии с температурой близкой к нулю. Полученные координаты и импульсы атомов использовались в качестве начальных данных для дальнейших расчетов.

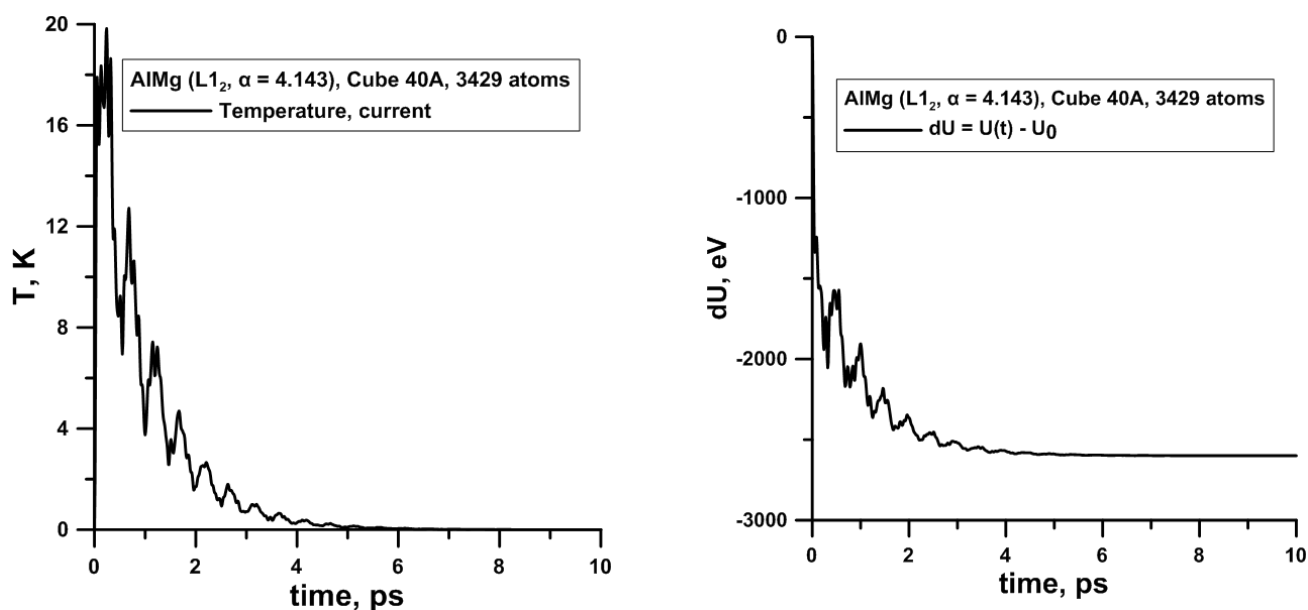


Рисунок 6.2 - Температура (слева) и изменение потенциальной энергии (справа) нанокластера  $\text{Al}_3\text{Mg}$

Следующим этапом расчетов являлся разогрев нанокластера до заданной температуры, для этого использовался метод стохастических сил. Второй особенностью процедуры разогрева являлось то, что через каждый интервал

$\Delta T=5$  К, система релаксировала до состояния термодинамического равновесия на временном интервале  $\Delta t=10^{-13}$  с. При этом все расчетные характеристики усреднялись по тепловым флуктуациям. На рисунке 6.3 представлен нанокластер  $Al_3Mg$  в плоскости XY в начальный момент времени (после приведения системы к минимуму потенциальной энергии) и в момент времени  $t=75$  пс (соответствующий температуре системы  $T=867,28$  К), непосредственно перед полным разрушением структуры.

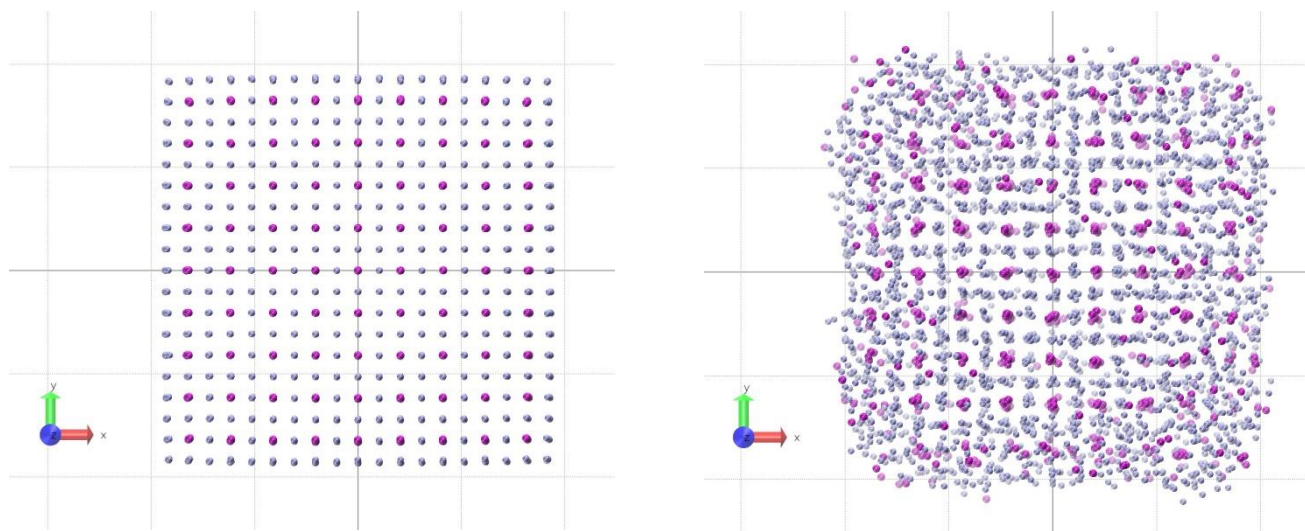


Рисунок 6.3 - Ортографическая проекция нанокластера  $Al_3Mg$  на плоскость XY в начальный момент времени (слева) и в момент времени  $t = 75$  пс (справа). Здесь синим цветом отображены атомы алюминия, фиолетовым – атомы магния. Шаг измерительной сетки 10 ангстрем

На рисунке 6.3 слева хорошо различимо поджатие внешних атомов кластера после охлаждения системы. Рисунок справа демонстрирует процесс разрушения вблизи точки плавления: видно, что процесс разрушения происходит с поверхности вглубь структуры.

Рисунок 6.4 демонстрирует зависимость температуры от времени при разогреве системы. Как видно из графика линейная зависимость температуры от времени нарушается вблизи точки  $T=900$  К, что соответствует фазовому переходу системы.

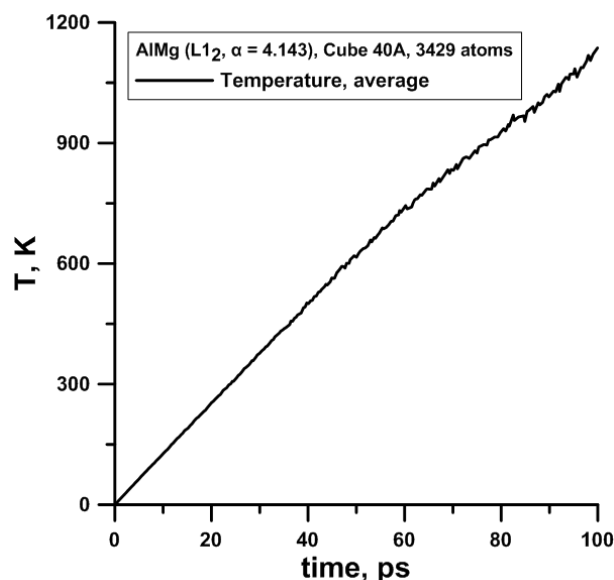


Рисунок 6.4 - Зависимость температуры системы от времени при разогреве нанокластера  $Al_3Mg$

Таким образом, полученный программный пакет успешно моделирует ряд базовых симуляций для сплава  $Al_3Mg$ , а также некоторых других сплавов с алюминием (были проведены аналогичные расчеты). Впоследствии база доступных потенциалов будет дополняться необходимыми элементами. Следует отметить, что выполненные модификации обладают хорошим уровнем оптимизации (не требуют больших вычислительных мощностей), что позволяет сократить время расчетов. Данный пакет полностью удовлетворяет поставленным целям настоящей работы и в дальнейшем может послужить основой для решения широкого круга задач.

## 6.2 Керамические структуры

Карбид кремния это перспективный и интересный материал в силу своей химической и физической стабильности, низкой плотности, высокой прочности и удельной твердости, а также высокой теплопроводности. Он широко используется при изготовлении различных фрикционных механизмов и оптоэлектронных устройств, газовых турбин и теплообменников. Карбид кремния также используется в электронных устройствах, предназначенных для эксплуатации в жестких внешних условиях. Кроме технических приложений, карбид кремния также активно

используется в медицине. Он вытесняет такие традиционные ортопедические материалы как сплавы кобальта хрома и нержавеющей стали, поскольку карбид кремния способен интегрироваться и обрастать новой костной тканью в силу высокой химической инертности.

Однако многие вопросы связанные с производством и обработкой карбида кремния до сих пор остаются недостаточно изученными. Так, при односточной алмазной токарной обработке (SPDT), принципиальное значение приобретают высокотемпературные явления, которые на микроуровне происходят между инструментом и обрабатываемым образцом.

Одной из особенностей карбида кремния является наличие огромного числа полиморфных модификаций. Все модификации основаны на одном и том же химическом соединении и являются идентичными в двух измерениях, но отличаются различной послойной компоновкой в третьем измерении (так называемый одномерный полиморфизм). Под действием интенсивных внешних нагрузок (например высокое давление) в карбиде кремния происходят различные фазовые трансформации. Однако значения этих давлений, полученных как в результате экспериментов, так и в результате численного моделирования отличаются в разы и не позволяют описать природу фазового перехода. Основным преимуществом метода молекулярной динамики (ММД) при моделировании быстрых структурных и фазовых трансформаций на микроуровне, является то, что ММД не требует никаких допущений или предположений о характере изучаемых процессов, а термодинамические свойства материала определяются потенциалом межатомного взаимодействия.

Следует отметить, что к настоящему моменту не существует межатомного потенциала взаимодействия, который бы позволял идеально описывать все виды физических процессов происходящих в карбиде кремния. Большая часть существующих моделей основана на формализме Терсоффа-Абея (Bond Order Potential). Общим ограничением этого формализма является то, что потенциал описывает пластическое поведение карбида кремния вместо хрупкого разрушения. Это накладывает серьезные ограничения на исследования на атомном уровне

механизмов износа и разрушения. С целью избавления от подобных ограничений, были сделаны попытки модифицировать механизм отбора ближайших соседей, т.е. внести изменения в радиус действия потенциала. Был разработана модель, в которой специальные экранирующие функции меняли радиус взаимодействия потенциала, что позволило описывать хрупкое поведение керамики [49]. Кроме потенциала, основанного на формализме Терсоффа-Абея, существует еще одна значимая группа потенциалов для описания межатомного взаимодействия в ковалентных материалах. Эта группа потенциалов основана на формализме Стиллинжера- Вебера (сумма двухчастичного и трехчастичного потенциалов).

На основе такого потенциала, предложенного [50] был разработан и программно реализован параллельный алгоритм для среды CUDA, позволяющий проводить расчеты с использованием графических процессоров компании NVIDIA.

На начальном этапе моделирования рассматривалась кубическая форма карбида кремния 3C-SiC имеющая кристаллическую структуру типа цинковой обманки (рисунок 6.5).

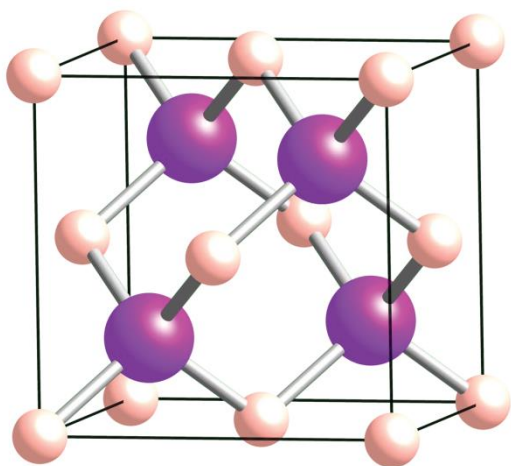


Рисунок 6.5 - Кристаллическая структура типа цинковой обманки. Атомы меньшего размера – кремний Si, атомы большего размера – углерод C

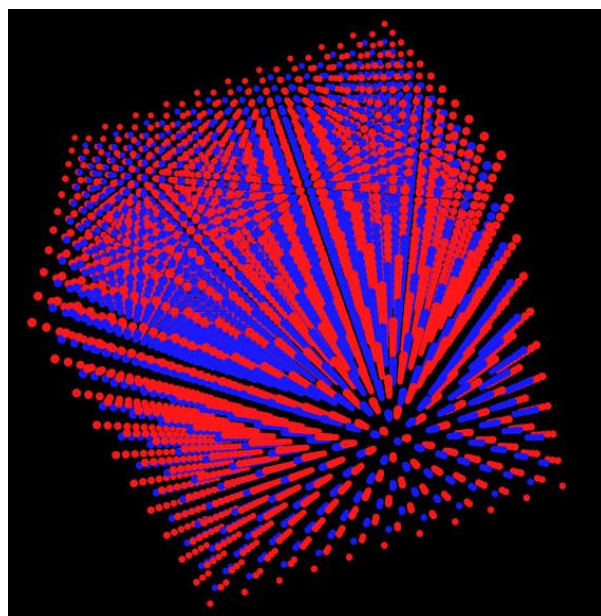


Рисунок 6.6 - Внешний вид моделируемой физической системы 3C-SiC. Красные атомы - Si, синие атомы - C

В качестве физической системы рассматривались кубические образцы, различных размеров и состоящие из различного числа атомов (рисунок 6.6, таблица 6.1). Интегрирование уравнения движений поводилось с использованием схемы Верле второго порядка точности по временному шагу. Шаг по времени при численном моделировании составлял  $10^{-16}$  с.

Численное моделирование показало, что созданные структуры 3C-SiC являются нестабильными и разрушаются без приложения внешней нагрузки через незначительный интервал времени.

**Таблица 6.1**

<b>Размер грани куба <math>a</math></b>	<b>Размер системы (кристаллические ячейки) вдоль осей XYZ</b>	<b>Число атомов в системе</b>
43,59	10*10*10	8631
65,385	15*15*15	28396
87,18	20*20*20	66461
108,98	25*25*25	128826

В качестве иллюстрации, на рисунке 6.7 приводится внешний вид кубической структуры в два момента времени. Из представленных зависимостей видно, что физическая система начинает терять первоначальную форму куба, а от граней кристалла отрываются группы атомов.

Энергетические характеристики, соответствующие таким структурным преобразованиям, представлены на рисунках 6.8–6.10. На рисунке 6.8 представлены зависимости кинетической температуры от времени для системы атомов углерода (красная пунктирная линия) и для системы атомов кремния (черная сплошная линия). После сильных флуктуаций в начальный момент времени, кинетические температуры выходят на постоянные асимптотические значения (после отрыва угловых атомов). На рисунках 6.9 и 6.10 изображены зависимости двух и трехчастичных частей потенциальной энергии всей системы от времени.

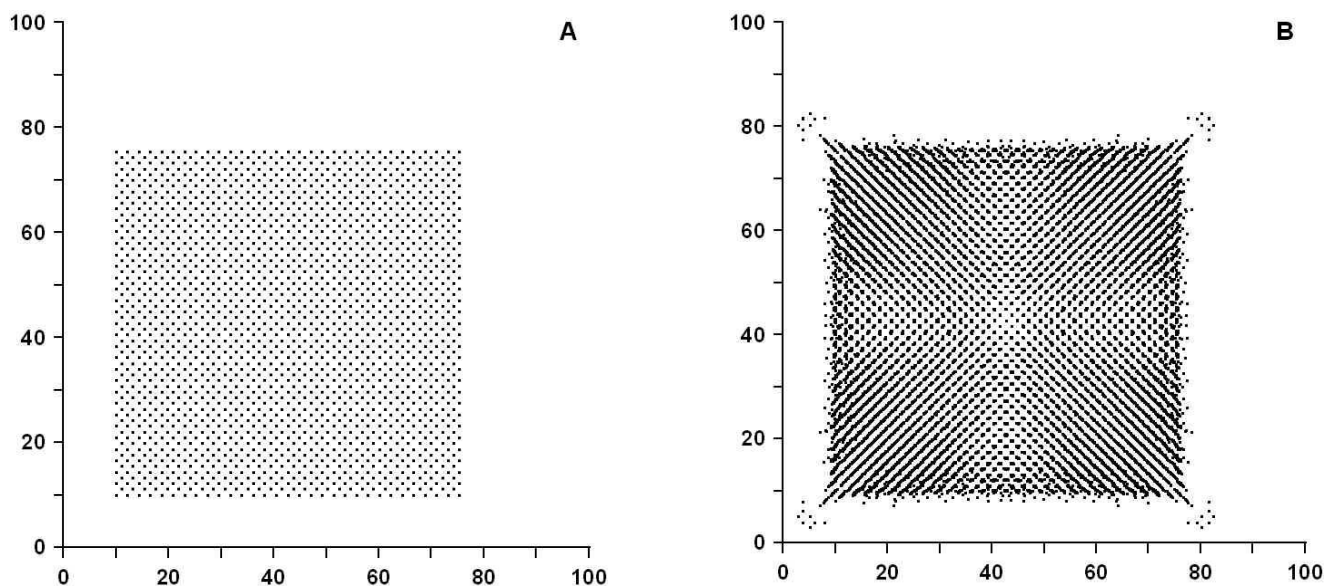


Рисунок 6.7 - Свободная динамика кристаллической структуры. А- начальный момент времени, В- через 0,6 пс

Дополнительно были проведены численные эксперименты, в которых вместо свободных границ были использованы периодичные граничные условия (ПГУ) в трех, в двух и в одном направлении. Было установлено, что моделируемая структура остается стабильной (не разрушается и не теряет первоначальной формы) при наложении ПГУ в двух и в трех направлениях.

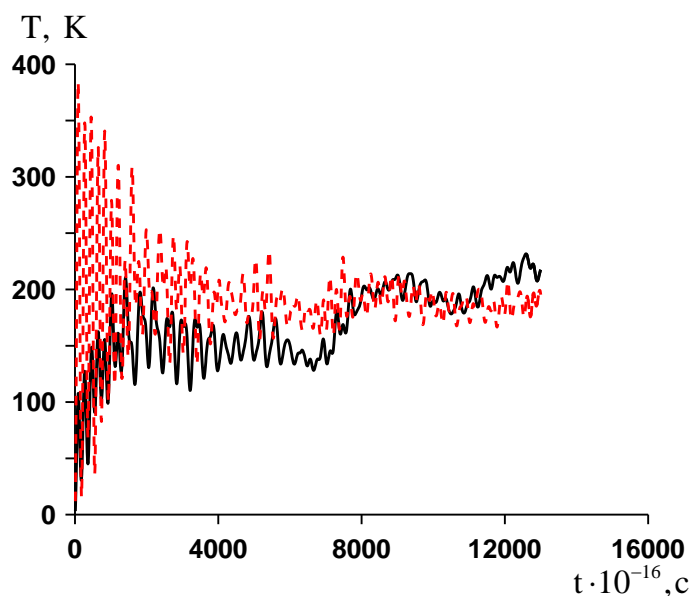


Рисунок 6.9 - Изменение кинетической температуры в системе со временем



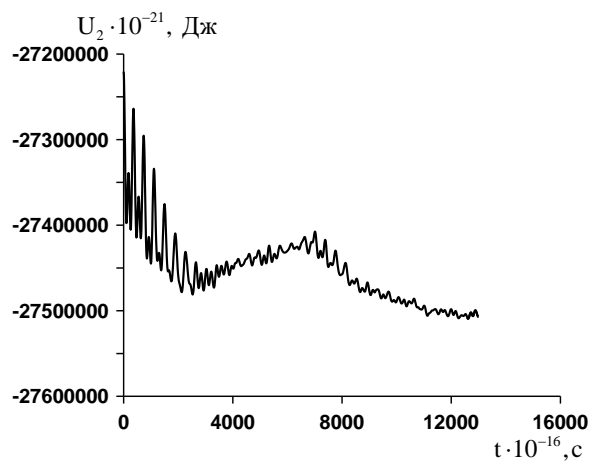


Рисунок 6.9 - Зависимость двухчастичной части потенциальной энергии от времени

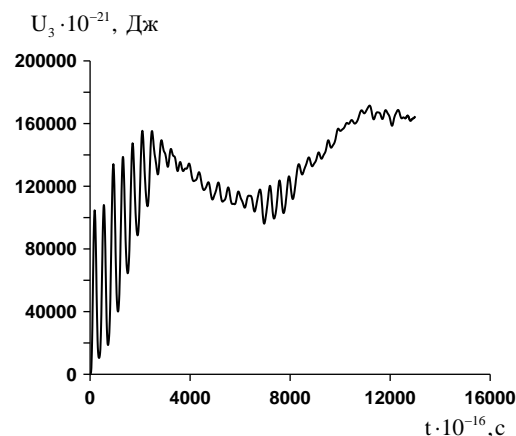


Рисунок 6.10 - Зависимость трехчастичной части потенциальной энергии от времени

При наложении ПГУ только в одном направлении, происходило разрушение физической системы аналогичное описанному выше для системы со свободными границами.

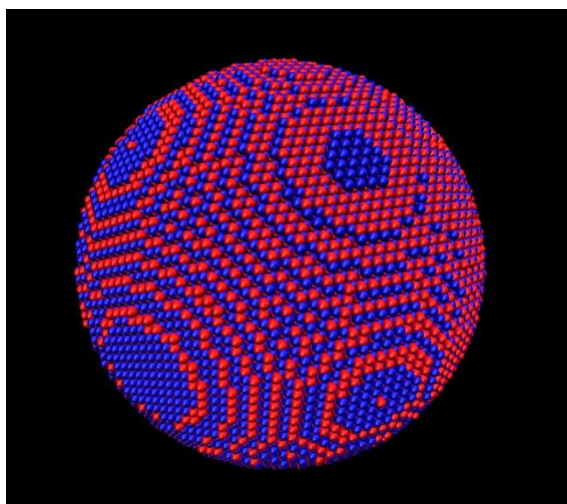


Рисунок 6.11 - Внешний вид моделируемой физической системы 3С-SiC. Красные атомы - Si, синие атомы - C

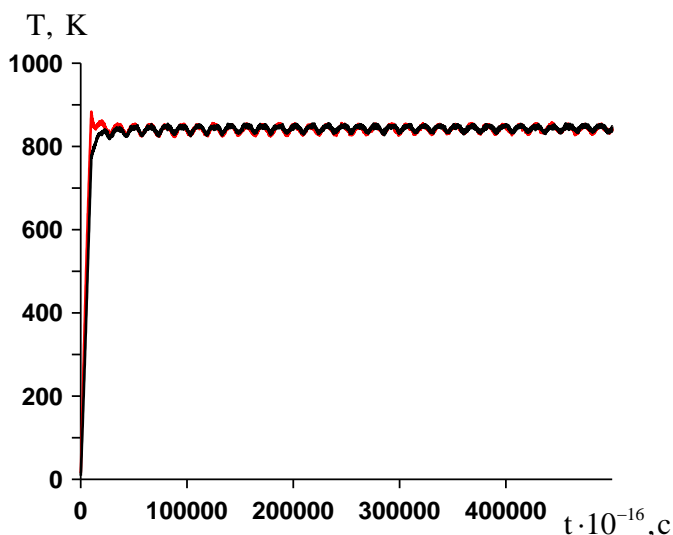


Рисунок 6.12 - Изменение кинетической температуры в системе со временем. Атомы углерода - красная линия, атомы кремния - черная сплошная линия



Таким образом, представленный межатомный потенциал нельзя использовать для описания поверхностных явлений в кубической форме карбида кремния 3C-SiC. Дальнейшие численные эксперименты показали, что кластеры сферической формы 3C-SiC являются достаточно устойчивыми и сохраняют свою форму (рисунок 6.11) даже при наличии внешних возмущений.

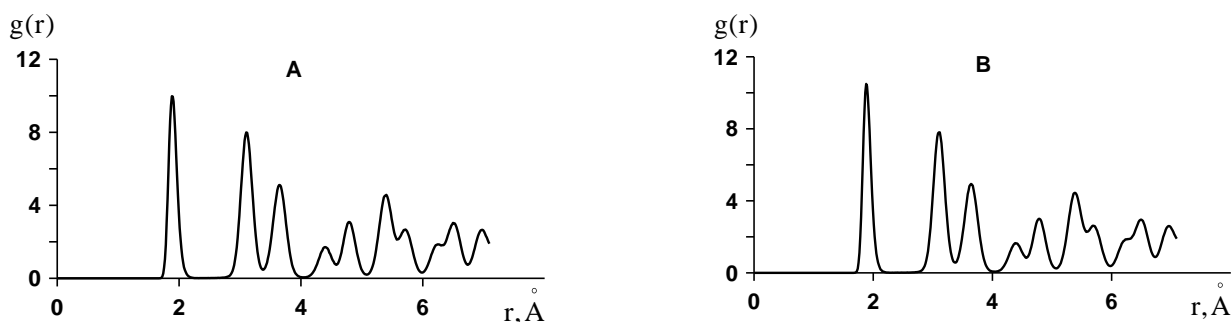


Рисунок 6.13 - Парная функция радиального распределения. А- 0,5 пс, В- 50 пс

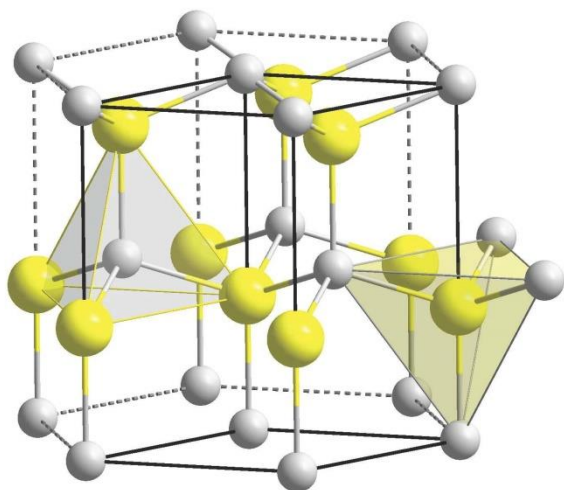


Рисунок 6.14 - Кристаллическая структура типа вюрцита. Атомы меньшего размера – кремний Si, атомы большего размера – углерод C

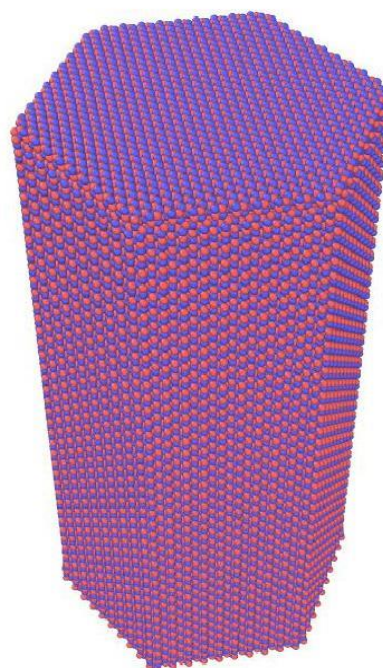


Рисунок 6.15 - Внешний вид моделируемой физической системы 2H-SiC. Красные атомы - Si, синие атомы - C

В качестве примера, на рисунке 6.12 представлены зависимости кинетической температуры от времени при прогреве системы до температуры 840 К (диаметр кластера составлял 13,3 нм, число атомов 113023). Для разогрева кластера была использована методика объемного прогрева, подробно описанная в настоящем отчете при описании методологии плавления медных кластеров.

Для анализа структурного состояния вещества была использована парная функция радиального распределения (рисунок 6.13). Видно, что прогретый кластер сохраняет свою кристаллическую структуру.

Созданная физическая модель также моделирует гексагональную форму карбида кремния 2H-SiC, которая имеет кристаллическую структуру типа вюрцита (рисунки 6.14, 6.15).

Таким образом, на основе выбранного потенциала для карбида кремния, был разработан и программно реализован параллельный алгоритм для среды CUDA, позволяющий проводить расчеты с использованием графических процессоров компании NVIDIA в рамках метода молекулярной динамики.

## **Заключение**

В результате выполнения исследований получены новые представления о термомеханических процессах, протекающих в конденсированных средах при интенсивных динамических воздействиях. Предложенные в настоящем проекте модели могут быть использованы при разработке новых материалов и технологий производства изделий и конструкций из них, подвергающихся статическому и динамическому нагружению.

Рассмотрено влияние структурного состояния поликристаллических металлов и сплавов на их термомеханические свойства в применении к задаче создания новых нанокристаллических высокотвердых материалов и определения их упругих модулей, предела текучести и ударной адиабаты. Показано, что в молекулярно-динамических расчетах при давлении большем 100 ГПа и температуре большей 2000 К стабильной оказывается объемно-центрированная кубическая (ОЦК), а не гранецентрированная кубическая (ГЦК) фаза.

В результате проделанной работы по получению керамики на основе карбида бора, а также диоксида кремния методом одноосного горячего прессования были определены параметры процесса, при которых происходит активное уплотнение порошкового вещества. Показано, что характерные температуры начала процесса спекания для исследованных порошков составляют: 1700-1750°C при давлении прессования 40 МПа для карбида бора и 1100-1150°C при давлении прессования 45 МПа для диоксида кремния. Для получения керамики из карбида бора с пористостью менее 2% необходимо производить прессование при температуре процесса 1900-1950°C и давлении выше 60 МПа. Показано, что с уменьшением среднего размера порошка карбида бора наблюдается рост модуля упругости при сжатии. Введение легирующих добавок диборида титана и кремния приводит к снижению модуля сжатия.

На основе динамического метода создан автоматический алгоритм построения тетрагональных сеток для произвольных 3D технических объектов. Проведена оценка качества отдельного сеточного элемента (ячейки) на основе вычисления характеристического параметра, значение которого зависит от формы тетраэдра, и

последующего сравнения результата со значением аналогичного параметра у правильного тетраэдра. Анализ генераторов тетраэдральных сеток и анализ результатов их работы, показал, что наибольшую перспективу в плане совершенствования алгоритмов пространственной триангуляции имеет направление по разработке эффективных методов генерации оптимального распределения сеточных узлов.

Построена модель динамического компактирования пористого материала необходимо учитывающая три основных элемента: уравнение, включающее в себя нелинейные эффекты уплотнения; поверхность текучести, описывающей зависимость прочности неповрежденного и разрушенного материала, зависящей от давления, и модель разрушения, описывающая переход материала из неповрежденного в разрушенное состояние.

Создана физико-математическая модель усталостных повреждений и разрушений металлов на микроуровне, исследование влияния начальных и внешних условий на их свойства на наномасштабном уровне позволят закрыть пробел в науке об усталостном разрушении, обусловленный сложностями проведения эксперимента по динамическим исследованиям накопления разрушений на атомном масштабе. Разработка такой модели позволит дать объяснение процессу циклического разрушения на разных масштабных уровнях.

Было установлено, что гексагональная форма карбида кремния является устойчивой и может быть использована для исследования свойств наностержней  $2H-SiC$ . В тоже самое время, потенциал не позволяет моделировать явления в наностержнях, имеющих структуру  $3C-SiC$ . Моделирование образцов  $3C-SiC$  имеющих форму параллелепипеда, возможно только при использовании периодических граничных условий, налагаемых в двух или трех направлениях. Структуры  $3C-SiC$  имеющие форму сферического кластера устойчивы к внешним воздействиям и позволяют проводить численное моделирование термомеханического воздействия с учетом поверхностных явлений.

Разработаны полные термодинамические уравнения состояния конденсированных сред, адекватно описывающие физику процессов соударения при

высоких давлениях и температурах, что позволяет проводить расчеты процессов взаимодействия твердых тел с минимальным числом физических параметров в качестве начальных данных. Эти уравнения описывают как однородные тела, так и механические смеси материалов.

Разработана методика моделирования процесса кристаллизации меди из расплава методом молекулярной динамики. Показано, что данная методика позволяет моделировать образование поликристаллов меди со средним размером зерна от 1 до 10 нм. Выполнены тестовые расчеты одноосного растяжения и сжатия. Получены зависимости модуля упругости и предела текучести от размера зерна. Проведено сравнение с другими авторами.

Создана модель процесса поглощения энергии излучения и преобразования ее в энергию волнового движения металла. Проведены тестовые расчеты и выполнено сравнение с результатами других авторов. Показано, что совместное решение тепловой и динамической задачи не позволяет адекватно описать процесс формирования ударной волны в металле. Это связано с тем, что в процесс поглощения энергии существенно изменяются как оптические свойства металла, так и транспортные свойства. На основе анализа опубликованных работ сделан выбор модели включающей следующие процессы: нагревание металла и его плавление, учет изменения оптических свойств (отражательная способность, коэффициент поглощения), превращение жидкого металла в плотный газ и его разлет со свободной поверхности, что формирует импульс отдачи в твердую часть образца, т.е. формирование ударной волны.

Подготовлены первые образцы из эпоксидной смолы ЭД-20 с добавлением гидрофильных нанопорошков  $\text{SiO}_2$  (аэросил) различной концентрации. Для создания образцов разработана технология получения гетерогенного материала на основе дисперсно-наполненных эпоксидных связующих. Выбраны параметры процесса, позволяющие получать композиционные материалы с равномерно диспергированным нанопорошком в матрице. Для разбиения агломератов в матрице использовался ультразвуковой диспергатор, а для удаления пузырьков воздуха применена технология вакуумирования. Проведены эксперименты на растяжение

образцов ЭД-20 с нанопорошком, полученных механическим перемешиванием и с ультразвуковым диспергированием (УЗД). Модуль Юнга увеличился на 12% и на 23% соответственно.

Методом молекулярной динамики промоделирован процесс разогрева наноструктур. Для этого использовалась основная теорема аналитической механики об изменении полной энергии механической системы. Численные эксперименты проводились для медных кластеров сферической формы с радиусом 40Å. На первом этапе было показано, что 5К является наиболее оптимальным значением приращения температуры для прогрева кластеров. Проведено сравнение нескольких схем разогрева наноструктур с использованием метода стохастических сил.

Предложен подход, позволяющий моделировать образование поликристаллических материалов из расплава путем его охлаждения. С помощью данного подхода получены атомные конфигурации меди, соответствующие поликристаллам со средним размером зерна от 2 до 16 нм. С использованием метода молекулярной динамики проведено исследование изотермического одноосного растяжения и сжатия полученных поликристаллов. Показано, что с уменьшением среднего диаметра зерна в нанокристаллической меди при  $d < 10$  нм модуль Юнга и предел текучести уменьшаются.

Определены оптимальные степени наполнения эпоксидной матрицы наночастицами. При введении наночастиц в оптимальных пропорциях прочность эпоксидного связующего на растяжение увеличивается на 32%. Построены зависимости модуля Юнга от размера нанопорошка. Показано, что максимум достигается в диапазоне размера наполнителей 14-18 нм.

Исследование механических свойств спеченных образцов из порошка диоксида кремния в зависимости от размера фракции показало, что с уменьшением размера фракции значительно увеличивается усадка, а также возрастает прочность на сжатие. При прессовании порошков с узким распределением частиц по размерам наблюдается увеличение теплового расширения. С ростом размера фракции наблюдается рост величины максимального теплового расширения.

На основе экспериментальных и численных исследований распространения ударных волн определены оптимальные режимы взрывного компактирования двухфазных порошковых сред, представляющих собой смеси твердых порошковых материалов с металлической связкой.

На основе созданной упрощенной методики расчета упругих свойств веществ и сравнение с общепринятыми моделями получены аналитические выражения для определения скорости звука, модуля сдвига и коэффициента Пуассона в конденсированных средах.

Представлена физическо-математическая модель для численного моделирования взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с металлами. Для численного решения связанной системы уравнений гиперболической двухтемпературной модели поглощения лазерного излучения и одномерной гидродинамики с малопараметрическим уравнением состояния построена согласованная разностная схема.

Разработана физико-математическая модель формирования сплавов. Показано, что на свойства металлических сплавов сильное влияние оказывают размеры и формы используемых порошков металлов, методы и скорости как прогрева этих порошков, так и охлаждения полученного сплава. Особенно большое многообразие термомеханических свойств сплавов получается при использовании наноструктурированных металлических порошков.

Анализ критериев откольного разрушения показал, что в материалах при растягивающих напряжениях возникают микропоры (микротрещины), которые обуславливают переход сплошной среды в пористую, в которой модуль сдвига и предел текучести являются функциями пористости и давления. При достижении критических значений пористости происходит объединение пор в макротрещины разрыва.

Проведено численное моделирование аварийного обрыва лопатки вентилятора газотурбинного двигателя. Построены зависимости напряжений от деформаций при динамическом нагружении для титановых сплавов ВТ6, ОТ4 и

ОТ4-0. Определены условия обеспечения непробиваемости корпусов двигателя при обрыве лопаток вентилятора.

Построена модель переходной среды, которая по своим прочностным характеристикам отвечает мягким породам. Проведены сравнительные расчеты удара модельного реактора ЯЭУ о поверхность Земли, которая представляет собой в первом случае однородную структуру (песчаник), во втором — неоднородную дискретную структуру (блоки из гранита, связанные цементной массой). Показано, что структура земной поверхности, с которой взаимодействует реактор, существенно изменяет картину разрушения последнего из-за различия в распространении волн сжатия.

Получены зависимости механических свойств порошка диоксида кремния от размера фракции при одноосном горячем прессовании. Показано, что при испытаниях на одноосное сжатие прочность горячепрессованных образцов возрастает с 3,5 до 36 МПа для порошков от 350 до 160 мкм соответственно.

Получены зависимости модуля Юнга при трехточечном изгибе от размера и концентрации наполнителей (до 4% масс.) для композитов на основе эпоксидных смол. Показано, что добавки порошков диоксида кремния различной дисперсности, нитрида алюминия и гидроксида алюминия повышают модуль упругости до концентраций 1% масс. на 5-10%. Рост прочности при трехточечном изгибе наблюдался при добавлении ультрадисперсного диоксида кремния (до 30% при 3,5% масс.)

Методом молекулярной динамики рассчитана зависимость ударной адиабаты от среднего размера зерна в ультрадисперсной меди. Показано, что температура за фронтом ударной волны для материала с размером зерна около 2 нм на 10% выше чем в поликристалле с размером зерна более 10 нм.

Исследованы способы разогрева и охлаждения нанокристалла при молекулярно-динамическом моделировании. Сделан вывод, что использование поверхностного метода охлаждения приводит к более физически достоверному описанию процессов энерго-массопереноса в системе в процессе фазового перехода;



дает зависимость атомного объема от температуры с характерным изломом при фазовом переходе.

Исследовано влияние формы и размера наноструктур на динамику процесса фазового перехода. Показано, что наноструктуры кубической и сферической формы, имеющие примерно одинаковое число атомов, имеют близкие характеристики фазового перехода «твердое тело – жидкость».

Исследовано влияние температуры медной подложки на процесс формирования на ней тонкой медной пленки с помощью молекулярно-динамического моделирования. При более высоких температурах в процессе осаждения атомов конечная система получается более близкой по структуре к идеальному кристаллу.

Исследовано влияние дефектов поверхности медной подложки на процесс формирования на ней тонкой медной пленки методом молекулярной динамики. Показано, что при малой шероховатости поверхностных дефектов наблюдается зарастание их осаждаемой пленкой. При значительных поверхностных дефектах наблюдается не только прорастание дефектов в пленку, но и образование вертикальной нанопоры.

### **Список использованных источников**

1. Bringa E.M. et al. Atomistic shock Hugoniot simulation of single-crystal copper // *J. Appl. Phys.* 2004. Vol. 96, № 7. P. 3793–3799.
2. Levitas V.I., Ravelo R. Virtual melting as a new mechanism of stress relaxation under high strain rate loading // *Proc. Natl. Acad. Sci.* . 2012. Vol. 109, № 33. P. 13204–13207.
3. Краус Е.И., Фомин В.М., Шабалин И.И. Моделирование процесса соударения сложных двумерных тел о деформируемую преграду // *Вычислительные технологии.* 2006. Vol. 11. P. 104–107.
4. Краус Е.И., Фомин В.М., Шабалин И.И. Динамический метод построения треугольных сеток в многосвязных областях // *Вычислительные технологии.* 2009. Vol. 14, № 5. P. 40–48.
5. Shimada K., Gossard D.C. Bubble mesh: Automated triangular meshing of non-manifold geometry by sphere packing // *Proc. third ACM Symp. Solid Model. Appl. (Proc. SMA '95).* 1995. P. 409–419.
6. Joe B. Construction of Three-Dimensional Improved-Quality Triangulations Using Local Transformations // *SIAM J. Sci. Comput. Society for Industrial and Applied Mathematics,* 1995. Vol. 16, № 6. P. 1292–1307.
7. Klingner B.M., Shewchuk J.R. Aggressive Tetrahedral Mesh Improvement // *Proceedings of the 16th International Meshing Roundtable.* Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008. P. 3–23.
8. Freitag L.A., Ollivier-Gooch C. Tetrahedral mesh improvement using swapping and smoothing // *Int. J. Numer. Methods Eng.* John Wiley & Sons, Ltd, 1997. Vol. 40, № 21. P. 3979–4002.
9. Суков С.А. Методы генерации тетраэдральных сеток и их программные реализации. Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша N23. Москва, 2015. 22 p.
10. Trunin R.F. Studies Performed in Russia into the Compressibility of Metals in Strong Shock Waves // *High Temp.* 2004. Vol. 42, № 1. P. 154–168.
11. Gourdin W.H. Dynamic consolidation of metal powders // *Prog. Mater. Sci.* 1986. Vol. 30, № 1. P. 39–80.

12. Graham R.A. Comments on Shock-Compression Science in Highly Porous Solids // High-Pressure Shock Compression of Solids IV: Response of Highly Porous Solids to Shock Loading / ed. Davison L., Horie Y., Shahinpoor M. New York, NY: Springer New York, 1997. P. 1–21.
13. Nesterenko V.F. Nonlinear Impulses in Particulate Materials // Dynamics of Heterogeneous Materials. New York, NY: Springer New York, 2001. P. 1–136.
14. Meyers M.A., Chawla K.K. Mechanical behavior of materials. 2nd revised ed. 2nd revise. Cambridge: Cambridge University Press, 2009. xxiii + 856 p.
15. Herrmann W. Constitutive Equation for the Dynamic Compaction of Ductile Porous Materials // J. Appl. Phys. 1969. Vol. 40, № 6. P. 2490–2499.
16. Grady D.E. et al. Computational modeling and wave propagation in media with inelastic deforming microstructure // Journal De Physique. IV : JP. 2000. Vol. 10, № 9. P. 15–20.
17. Carroll M.M., Holt A.C. Static and Dynamic Pore- Collapse Relations for Ductile Porous Materials // J. Appl. Phys. 1972. Vol. 43, № 4. P. 1626–1636.
18. Tong W., Ravichandran G. Recent Developments in Modeling Shock Compression of Porous Materials // High-Pressure Shock Compression of Solids IV: Response of Highly Porous Solids to Shock Loading / ed. Davison L., Horie Y., Shahinpoor M. New York, NY: Springer New York, 1997. P. 177–203.
19. Fomin V.M., Kiselev S.P. Elastic-Plastic Waves in Porous Materials // High-Pressure Shock Compression of Solids IV: Response of Highly Porous Solids to Shock Loading / ed. Davison L., Horie Y., Shahinpoor M. New York, NY: Springer New York, 1997. P. 205–232.
20. Rajendran A.M. Historical perspective on ceramic materials damage models // Ceramic transactions 134. 2002. Vol. 134. P. 281–297.
21. Anderson C.E.J. A review of computational ceramic armor modelling // Proc. 30th Int. Conf. Adv. Ceram. Compos. 2014. P. 1–18.
22. Holmquist T.J., Johnson G.R., Cook W.H. A computational constitutive model for concrete subjected to large strains, high strain rates, and high pressures.pdf // 14th International Symposium on Ballistic, Quebec City, Canada. 1993. P. 1–10.

23. Holmquist T.J., Johnson G.R. Characterization and evaluation of silicon carbide for high-velocity impact // *J. Appl. Phys.* 2005. Vol. 97, № 9. P. 93502.
24. Johnson G.R., Holmquist T.J. An improved computational constitutive model for brittle materials // *AIP Conf. Proc.* 1994. Vol. 309, № 1. P. 981–984.
25. Simulia. *Abaqus Example Problems Manual*. Providence, RI: Dassault Systemes, 2011.
26. Stuivinga M., Verbeek H., Carton E.. The double explosive layer cylindrical compaction method // *J. Mater. Process. Technol.* 1999. Vol. 85, № 1–3. P. 115–120.
27. Mamalis A.G., Vottea I.N., Manolakos D.E. On the modelling of the compaction mechanism of shock compacted powders // *J. Mater. Process. Technol.* 2001. Vol. 108, № 2. P. 165–178.
28. Mamalis A.G. et al. Numerical simulation of explosive consolidation of superconducting bulk components // *Int. J. Mod. Phys. B.* 2003. Vol. 17, № 18–20 II. P. 3563–3567.
29. Johnson G.R., Cook W.H. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures // *Seventh International Symposium on Ballistics.* 1983. P. 541–547.
30. Johnson G.R., Cook W.H. Fracture characteristics of three metals subjected to various strains, strain rates, temperatures and pressures // *Eng. Fract. Mech.* 1985. Vol. 21, № 1. P. 31–48.
31. Sutrarakar V.K. Atomistic modeling of strain-controlled cyclic loading in TiAl crystalline nanowire // *J. Phys. Condens. Matter.* 2014. Vol. 26, № 26. P. 265003.
32. Horstemeyer M.F. et al. Nanostructurally small cracks (NSC): A review on atomistic modeling of fatigue // *Int. J. Fatigue.* 2010. Vol. 32, № 9. P. 1473–1502.
33. Potirniche G.P., Horstemeyer M.F. On the growth of nanoscale fatigue cracks // *Philos. Mag. Lett.* 2006. Vol. 86, № 3. P. 185–193.
34. Farkas D., Willemann M., Hyde B. Atomistic mechanisms of fatigue in nanocrystalline metals // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94, № 16.
35. Chang W.-J., Fang T.-H. Influence of temperature on tensile and fatigue behavior of nanoscale copper using molecular dynamics simulation // *J. Phys. Chem. Solids.*

2003. Vol. 64, № 8. P. 1279–1283.
36. Lo Y.C. et al. Structural relaxation and self-repair behavior in nano-scaled Zr-Cu metallic glass under cyclic loading: Molecular dynamics simulations // *Intermetallics*. 2010. Vol. 18, № 5. P. 954–960.
  37. Ma L. et al. Molecular dynamics simulation of fatigue crack propagation in bcc iron under cyclic loading // *Int. J. Fatigue*. 2014. Vol. 68. P. 253–259.
  38. Božić Ž. et al. Multiscale fatigue crack growth modelling for welded stiffened panels // *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* 2014. Vol. 37, № 9. P. 1043–1054.
  39. Tang T. et al. Atomistic modeling of crack growth in magnesium single crystal // *Eng. Fract. Mech.* 2011. Vol. 78, № 1. P. 191–201.
  40. Miller G.H., Ahrens T.J., Stolper E.M. The equation of state of molybdenum at 1400 °C // *J. Appl. Phys.* 1988. Vol. 63, № 9. P. 4469.
  41. Ailin L., Wang K.W., Bakis C.E. Multiscale damping model for polymeric composites containing carbon nanotube ropes // *J. Compos. Mater.* 2010. Vol. 44, № 19. P. 2301–2323.
  42. Lee B.J., Baskes M.I. Second nearest-neighbor modified embedded-atom-method potential // *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* 2000. Vol. 62, № 13. P. 8564–8567.
  43. Lee B.-J. et al. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 64, № 18. P. 184102.
  44. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals // *Phys. Rev. Lett.* 1983. Vol. 50, № 17. P. 1285–1288.
  45. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Phys. Rev. B*. 1984. Vol. 29, № 12. P. 6443–6453.
  46. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical *N*-body potential for transition metals // *Philos. Mag. A* . 1984. Vol. 50, № 1. P. 45–55.
  47. Mendeleev M.I. et al. Development of interatomic potentials appropriate for simulation of solid–liquid interface properties in Al–Mg alloys // *Philos. Mag.* 2009. Vol. 89, № 34–36. P. 3269–3285.

48. Головнева Е.И., Головнев И.Ф., Фомин В.М. Моделирование квазистатических процессов в кристаллах методом молекулярной динамики // Физическая мезомеханика. 2003. Vol. 6. P. 5–10.
49. Pastewka L. et al. Screened empirical bond-order potentials for Si-C // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2013. Vol. 87, № 20. P. 205410.
50. Vashishta P. et al. Interaction potential for silicon carbide: A molecular dynamics study of elastic constants and vibrational density of states for crystalline and amorphous silicon carbide // J. Appl. Phys. 2007. Vol. 101, № 10. P. 103515.

**Приложение 1 Перечень статей, опубликованных по тематике проекта в 2016 г.  
в соответствии с государственным заданием**

1. Игошкин А.М., Головнев И.Ф., Крисюк В.В., Игуменов И.К. Структура тетрагидробората циркония  $Zr(BH_4)_4$ : молекулярно-динамическое исследование // Журнал структурной химии. - 2016. -Т.57, No.6. -С. 1130-1135.
2. Головнев И.Ф., Головнева Е.И., Мержиевский Л.А. Влияние размера наноструктур на параметры ротационных полей, инициируемых внешним сжимающим напряжением // Физическая мезомеханика. - 2016. -Т.19, No.5. -С. 66 - 73.
3. Merzhievsky L.A., Golovnev I.F., Golovneva E.I. Molecular-dynamic simulation of nanocrystal structure evolution under dynamic loading // AIP Conference Proceedings. 2016. Т. 1785. № 1. – С. 020002.
4. Filippov A.A., Fomin V.M., Malikov A.G., Orishich A.M. Selective laser sintering of cermet mixtures Ti and  $B_4C$  // 18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR2016) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016): AIP Conference Proceedings. -Vol.1770. -S.1., 2016. -030095 p.
5. Ахметов Т.Д., Болеста А.В., Еманов Ф.А., Руденко А.С., Тельнов В.И., Шошин А.А. Задачи по механике и теории относительности: учебное пособие / Под ред. В.И. Тельнова; Новосибирский гос. ун-т. -Новосибирск: РИЦ НГУ, 2016. -169 с.
6. Buzyurkin A.E., Kraus E.I., Lukyanov Ya.L. Dynamic compaction of boron carbide by a shock wave // 18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR2016) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016): AIP Conference Proceedings. -Vol.1770. -S.1., 2016. -030091 p.
7. Kraus E.I., Shabalin I.I. Reactor2D: A tool for simulation of shock deformation // 18th International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR2016) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : AIP Conference Proceedings. -Vol.1770. -S.1., 2016. -030092 p.

8. Brusentseva, T.A. Experimental investigations of mechanical and electrical characteristics of a nanomodified epoxy resin DER-330. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering 156 (1): 2016, 012028.
9. Kraus, E. I. and I. I. Shabalin A few-parameter equation of state of the condensed matter. Journal of Physics: Conference Series 774(1): 2016, 012009.
10. A.E. Buzyurkin, E.I. Kraus and Ya.L. Lukyanov The fabrication of boron carbide compacts by explosive consolidation. Journal of Physics: Conference Series **774**(1): 2016, 012067.
11. Краус Е.И., Шабалин И.И. Воздействие высокоскоростных частиц техногенного космического мусора на сложные технические объекты и их элементы // Исследования наукограда. 2016. № 3-4. С. 6-11.

### **Труды конференций и тезисы докладов**

1. Филиппов А.А., Фомин В.М. Определение механических характеристик наноматериалов при растяжении и сжатии // Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций (Россия, Томск, 19-23 сент. 2016 г.) : тезисы докладов Международной конференции. -Томск: ИФПМ СО РАН, 2016. -С. 177-178.
2. Смирнов С.В., Веретенникова И.А., Фомин В.М., Брусенцева Т.А., Филиппов А.А. Исследование механических свойств эпоксидной смолы при различном содержании наночастиц диоксида кремния // Актуальные проблемы прочности : сборник тезисов LVII международной конференции (Севастополь, Россия, 24–27 мая 2016 г.). -Севастополь, 2016. -С. 144.
3. Мержиевский Л.А., Головнев И.Ф., Головнева Е.И. Молекулярно-динамическое моделирование эволюции структуры нанокристалла при динамическом нагружении. // X Международная конференция «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций», Екатеринбург, Россия 16-20 мая 2016 г.: сборник материалов. – Екатеринбург: ИМАШ УрО РАН, 2016. – 385 с.



4. И.Ф. Головнев, Е.И. Головнева, Л.А. Мержиевский Молекулярно-динамическое исследование влияния размеров наноструктур на динамику ударно-волнового сжатия. // Всероссийская конференция «Нелинейные волны: теория и новые приложения», посвященная 70-летию со дня рождения чл.-корр. РАН В.М. Тешукова, Новосибирск, Россия 29 февраля – 2 марта 2016 г. : тезисы докладов. – Новосибирск, 2016. -С. 39-40.
5. I. Golovnev, E. Golovneva, V. Fomin The molecular-dynamic research of the rotary field appearance during metal nanostructure elongation with constant strain rate. // The 26th International Workshop on Computational Mechanics of Materials (IWCMM 26). Tomsk, Russia September 14–16, 2016: Book of Abstracts. – Tomsk: Institute of Strength Physics and Materials Science, Russian Academy of Sciences. – pp.18-19.
6. В.М. Kuchumov, I.K. Igumenov, Y.V. Shevtsov, I.F. Golovnev, E.I Golovneva Simulation of image transfer in a slot structure in MOCVD PROCESSES. // Всероссийская школа-конференция с международным участием «Химия и физика горения и дисперсных систем», посвященная 110-летию со дня рождения члена-корреспондента АН СССР А.А. Ковальского. Новосибирск, ИХКГ СО РАН, 19-20 сентября 2016 г. Сборник тезисов докладов.- с.39.
7. L.A. Merzhievsky, I.F. Golovnev, E.I. Golovneva Molecular-dynamic simulation of nanocrystal structure evolution under shock loading. // Fifth International Symposium on explosion, Shock Wave and High-strain-rate Phenomena, 25-28 September 2016, Beijing, China. Conference Proceedings. – pp.247-248.
8. Л.А. Мержиевский, И.Ф. Головнев, Е.И. Головнева. Особенности ударного сжатия нанокристаллов. Молекулярно-динамическое исследование. // XVI Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование», Саров, Россия, 3-7 октября 2016. – с.84.
9. Kraus E. I., Shabalin I.I. A few-parameter equation of state of the condensed matter // XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2016) (Russia, Elbrus, 1-6 Mar., 2016) : book of abstracts. -Moscow; Chernogolovka; Nalchik, 2016. -P. 48.

10. Buzyurkin A.E., Kraus E.I., Lukyanov Ya.L. The fabrication of boron carbide compacts by explosive consolidation // XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2016) (Russia, Elbrus, 1-6 Mar., 2016) : book of abstracts. - Moscow; Chernogolovka; Nalchik, 2016. -P. 163.
11. Kraus E.I., Shabalin I.I. Reactor2D: a tool for modeling of shock deformation // XVIII International Conference on the Methods of Aerophysical Research (ICMAR-16) (Russia, Perm, 27 Jun.-3 Jul., 2016) : abstracts. pt. II. -Perm, 2016. -P. 114-115.
12. Bolesta A.V., Fomin V.M. Molecular-dynamics modeling of phase transformation in copper under shock conditions // XXXI International Conference on Equations of State for Matter (ELBRUS 2016) (Russia, Elbrus, 1-6 Mar., 2016): book of abstracts. - Moscow; Chernogolovka; Nalchik, 2016. -P. 90.
13. Краус Е.И., Шабалин И.И. Reactor2D – инструмент моделирования ударного деформирования и разрушения твердых тел // Тезисы докладов 6-й Всероссийской научной конференции с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред».– Москва, ИПРИМ РАН, 2016 – 188-189 с.
14. Filippov A.A., Fomin V.M., Malikov A.G., Orishich A. M., Ryashin N.S., Kosarev V.F. Influence of laser radiation on Ti and B<sub>4</sub>C cermet mixtures // Тезисы докладов Международного семинара «Междисциплинарные проблемы аддитивных технологий», Томск, Россия, 6-9 декабря 2016. – с.10.

**Приложение 2 Количество статей, опубликованных по тематике проекта в 2013-2016 г. в соответствии с государственным заданием**

индикатор	Ед. измерения	Всего за 2013-2016 гг.	2013	2014	2015	2016
Количество публикаций в ведущих российских и международных журналах по результатам исследований, полученных в процессе реализации проекта	единиц		<b>13</b>	<b>11</b>	<b>11</b>	<b>11</b>
Количество публикаций в мировых научных журналах, индексируемых в базе данных «Сеть науки» (WEB of Science)	единиц		<b>4</b>	<b>3</b>	<b>9</b>	<b>9</b>
Число тезисов в конференциях	единиц		<b>20</b>	<b>14</b>	<b>24</b>	<b>12</b>
Число охраняемых объектов интеллектуальной собственности: зарегистрированных патентов в России зарегистрированных патентов за рубежом	единиц единиц	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>