

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения  
Российской академии наук

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ**  
**Перспективные материалы**  
**с иерархической структурой**  
**для новых технологий**  
**и надежных конструкций**  
**9 - 13 октября 2017 года**  
**Томск, Россия**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

Томск – 2017

---

## **УСТОЙЧИВОСТЬ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ НЕРАВНОВЕСНЫХ СТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ В НИКЕЛЕ ПРИ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ**

Корчуганов А.В., Зольников К.П., Крыжевич Д.С.

*Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской  
академии наук, Томск, Россия  
avkor@ispms.tsc.ru*

Изучено формирование локализованных неравновесных состояний в кристаллите никеля при сложной схеме механического нагружения. Расчеты проведены в рамках молекулярно-динамического подхода. К моделируемому образцу прикладывались локальные сжимающие и сдвиговые нагрузки. Были проанализированы коллективные атомные перестройки, приводящие к генерации и распространению нанополос локализации упругих сдвигов и поворотов. Изучены особенности их формирования при различных режимах механического нагружения. Проведены оценки упругой кривизны кристаллической решетки для сформированных локализованных неравновесных структурных состояний и изучена их стабильность при изменении нагрузки и температуры. Проведено сравнение результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 17-19-01374.

## **МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОРИСТОЙ КЕРАМИКИ МЕТОДОМ ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ**

Смолин А.Ю., Еремина Г.М., Смолин И.Ю., Смолина И.Ю.

*Институт физики прочности и материаловедения  
Сибирского отделения РАН, Россия,*

*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия,  
Томский государственный архитектурно-строительный университет, Россия  
asmolin@ispms.tsc.ru*

Для предсказания физико-механических свойств композиционных материалов в зависимости от их структуры используются различные подходы, но до сих пор эта задача не является полностью решённой. При аналитическом решении данной задачи наиболее успешными следует признать подходы механики композитов и микромеханики, основанные на методе самосогласованного поля и методе случайных функций. Однако эти успехи относятся лишь к оценке тех свойств, которые определяют распространение различного типа возмущений: упругих, тепловых и электромагнитных. Что касается прочности, то возможности этих подходов по сути ограничены материалами с периодической структурой. Однако сложность указанной задачи заключается в том, что свойства реальных материалов в значительной мере определяются их многомасштабной структурой. Современные технологии производства керамик способны создавать материалы с очень сложной структурой как пористого пространства, так и самой матрицы, что собственно и

### 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

обеспечивает им высокие функциональные свойства. Для решения данной проблемы в работе предлагается использовать многоуровневое компьютерное моделирование на основе метода подвижных клеточных автоматов (ПКА).

ПКА является эффективным дискретным методом вычислительной механики, в котором предполагается, что материал состоит из набора элементарных объектов, силы между которыми определяются в соответствии с правилами многочастичного взаимодействия. В данной работе этот метод развит для многоуровневого моделирования керамики с учётом структуры её пористого пространства.

Начальным уровнем в описании рассматриваемого материала является масштаб самых мелких пор. В расчётах на этом уровне они учитываются явно. Генерируются образцы разного размера с различным распределением пор по объёму. По результатам расчетов для каждого образца определяются модуль сжатия и предел прочности. Затем для каждого размера находится среднее значение по образцам с различным вариантом распределения пор по объёму. Анализируется сходимость средних значений модуля сжатия и предела прочности при увеличении размера соответствующих образцов и таким образом определяется размер представительного образца. По модулям сжатия и пределам прочности представительных образцов вычисляются параметры функции отклика автоматов данного уровня, а также параметры распределения Вейбулла, описывающего отклонение прочностных и упругих свойств различных представителей представительных образцов. Эти параметры позволяют переходить к расчетам следующего уровня, где, например, из автоматов предыдущего уровня состоят стенки макропор, а сами макропоры учитываются явно. Если всего масштабных уровней  $n$ , то необходимо проводить  $n-1$  дополнительных расчетов с переносом параметров с каждого из предыдущих уровней.

Возможности предложенного подхода продемонстрированы на примере моделирования керамики диоксида циркония с двумя характерными размерами пор. Показано, что на конечном макроскопическом уровне результаты моделирования позволяют описывать характерные упругие и прочностные свойства керамики и особенности её разрушения.

Работа выполнена в рамках проекта 23.2.3 Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук (ПФНИ ГАН) на 2013-2020 годы.

#### **ЗАКОНОМЕРНОСТИ ЛОКАЛИЗАЦИИ ДЕФОРМАЦИИ В ТИТАНЕ С МОДИФИЦИРОВАННЫМИ ПОВЕРХНОСТНЫМИ СЛОЯМИ**

Балохонов Р.Р., Романова В.А., Панин А.В., Казаченок М.С., Мартынов С.А.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

Численно исследованы процессы локализации пластического течения в технически чистом титане, поверхностно модифицированном электронными пучками и ультразвуковой обработкой. Структура и механические свойства