

На правах рукописи

Эбель Андрей Александрович

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ
ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ ОТРАЖЕНИИ УДАРНОЙ ВОЛНЫ
ОТ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА С НАНОРЕЛЬЕФОМ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Челябинск – 2017

Работа выполнена на кафедре общей и прикладной физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Челябинский государственный университет»

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и прикладной физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Челябинский государственный университет»
Майер Александр Евгеньевич

Официальные оппоненты:

Волков Николай Борисович – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт электрофизики» Уральского отделения Российской академии наук

Стариков Сергей Валерьевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник федерального государственного бюджетного учреждения науки «Объединённый институт высоких температур» Российской академии наук

Ведущая организация:

«Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук» – филиал федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук

Защита состоится _____ 2018 г. в _____ на заседании диссертационного совета Д 212.296.03 в Челябинском государственном университете по адресу: 454001, г. Челябинск, ул. Бр. Кашириных, 129, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Челябинского государственного университета.

Автореферат разослан «__» _____ 20__ г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
профессор

Е.А. Беленков

Общая характеристика работы

Актуальность темы. В настоящее время развиваются методы генерации ультракоротких ударных волн в твердых телах интенсивным лазерным излучением пико- и фемтосекундной длительности [1-6]. С точки зрения физики конденсированного состояния важно, что такое излучение может создавать импульсы ударного сжатия длительностью десятки пикосекунд и амплитудой от единиц до десятков гигапаскалей [3-6]. Импульс ударного сжатия представляет собой ударную волну и следующую за ней волну разрежения. Интерес представляет взаимодействие таких импульсов с тыльной поверхностью облучаемого твердого тела, которое может сопровождаться явлением откола [4-8], а также выбросом частиц вещества за счет развития неустойчивости Рихтмайера-Мешкова [9-13]. Откольное разрушение твердых тел наблюдается при отражении импульса ударного сжатия от свободной поверхности, когда возникает импульс растяжения, характеризующийся отрицательным давлением. Отрицательное давление инициирует образование, рост и объединение микро- или наноразмерных полостей. При отражении импульсов сжатия длительностью в десятки пикосекунд скорости деформации достигают величин порядка обратных наносекунд, что обеспечивает значения откольной прочности близкие к теоретическому пределу [4,5,7]. Быстрота протекающих процессов и малая толщина мишени позволяют напрямую использовать метод молекулярной динамики (МД) для описания распространения и отражения импульсов сжатия [14-21].

При анализе устойчивости к тыльному отколу важным является как прочность материала по отношению к действию растягивающих напряжений, так и соотношение между амплитудами падающего и отраженного импульсов. Прочность металлов к растяжению интенсивно исследовалась при помощи МД моделирования, в том числе исследовалось влияние включений [14,22,23], полостей [17,24], границ зерен [16,20,21], двойников. Проблема уменьшения амплитуды волны растяжения, формирующейся у свободной поверхности, также заслуживает внимания. Наличие нанорельефа или осажденных наночастиц на свободной поверхности может влиять на ослабление отраженной ударной волны за счет потерь энергии на пластическую деформацию. Существуют работы по МД моделированию выброса струй с наноструктурированной тыльной поверхности металлов под действием сильных ударных волн [11-13]. В то же время, актуальным остается проведение МД исследований влияния рельефа тыльной поверхности или осажденных наночастиц на порог откола.

Импульсы ударного сжатия могут использоваться для консолидации порошков металлов и других материалов [25,26]. Специфика сжатия ударной волной состоит в локализации зоны высоких температур вдоль поверхности компактируемых частиц, что позволяет сохранить микроструктуру их внутренних частей. Такое сжатие может приводить к формированию микро- или наноструктурированных металлов [27,28], неметаллических соединений [29-32] и композитов [33-36]. В настоящее время ударная волна для компактирования порошка генерируется детонацией заряда взрывчатого вещества [32-34], либо высокоскоростным ударником, ускоряемым газовой пушкой [27,28,31,35] или магнитным полем [29], либо мощным лазерным облучением слоя вспомогательного

материала [31,37]. При этом сам порошок помещается в контейнер внутри ударно нагружаемой сборки, предотвращающей разлет частиц. При уменьшении размеров частиц сила адгезии становится достаточно существенной, чтобы предотвращать разлет частиц без использования контейнера. Актуальным является исследование возможности компактирования наночастиц, нанесенных на поверхность тонкой металлической фольги, ударными волнами инициированными облучением противоположной поверхности фольги.

Цель диссертационной работы составило молекулярно-динамическое исследование интенсивной пластической деформации при отражении ударной волны от свободной поверхности металла с нанорельефом или осажденными наночастицами, а также ее влияния на порог откола и возможность ее использования для компактирования наночастиц в нанокристаллическое покрытие. Конкретными **задачами работы** были:

1. Исследование влияния нанорельефа свободной поверхности твердотельного образца на порог откола при отражении пикосекундных импульсов ударного сжатия от этой поверхности;

2. Исследование интенсивной пластической деформации при отражении импульса ударного сжатия от поверхности с осажденными наночастицами и их влияния на порог откола;

3. Анализ возможности компактирования наночастиц, свободно лежащих на подложке, ударными волнами, вышедшими из подложки.

Метод исследования. Исследование рассматриваемых в диссертации процессов проводилось при помощи численного эксперимента. В качестве метода расчетов был выбран метод классической молекулярной динамики. Молекулярно-динамическое моделирование осуществлялось с помощью пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [38]. Визуализация и анализ данных выполнялись при помощи программы OVITO (Open Visualization Tool) [39]. Визуализация дефектной структуры осуществлялась на основе центрально-симметричного параметра [40], который для идеальной ГЦК решетки равен нулю, а отличие от нуля показывает степень дефектности; также применялся алгоритм “Common neighbor analysis” [41,42]. Интенсивность сдвиговой деформации рассчитывалась по смещению атомов [43,44]. Площадь свободной поверхности, ограничивающей занятые атомами области от пустот, находилась при помощи алгоритма “Construct surface mesh” [45].

Научная новизна:

1. Впервые показано, что наличие нанорельефа свободной поверхности может приводить к увеличению порога откольного разрушения при воздействии импульсов ударного сжатия пикосекундной длительности за счет ослабления отраженных импульсов растяжения вследствие потерь энергии на интенсивную пластическую деформацию элементов нанорельефа.

2. Показано, что наличие на поверхности осажденных наночастиц приводит при отражении ударных волн от поверхности к существенным потерям энергии на интенсивную пластическую деформацию, ослаблению отраженных импульсов сжатия и увеличению порога откола по отношению к импульсам ударного сжатия пикосекундной длительности.

3. Впервые продемонстрирована возможность ударно-волнового компактирования слоя наночастиц, лежащих на поверхности подложки и связанных с ней только силами адгезии, в нанокристаллическое покрытие при воздействии серии ударных волн, вышедших из подложки. Найдены условия лазерного облучения противоположной поверхности подложки, которые могут использоваться для генерации серии ударных волн и компактирования наночастиц.

Практическая значимость работы. Практическая значимость диссертационной работы заключается в том, что обнаруженный механизм повышения устойчивости к отколу может использоваться при разработке защитных конструкций. Предложенный метод компактирования наночастиц на поверхности подложки может использоваться для нанесения защитных и функциональных покрытий.

Достоверность результатов. Достоверность полученных результатов обусловлена использованием хорошо апробированного метода МД и потенциалов межатомного взаимодействия, а также хорошо апробированных комплексов программ для проведения расчета и анализа результатов, соответствием значений откольной прочности алюминия и меди при отражении ударной волны от плоской свободной поверхности экспериментальным данным. Помимо этого, обнаруженные явления и закономерности могут быть полностью объяснены на основе существующих теоретических представлений в области физики конденсированного состояния.

Личный вклад автора состоит в участии в формулировке цели и задач исследования, в выборе метода решения задач, поставленных в работе, в моделировании процесса интенсивной пластической деформации при отражении ударной волны от свободной поверхности металла с нанорельефом и от поверхности с осажденными наночастицами, включая проблему компактирования наночастиц, анализе полученных результатов, подготовке научных публикаций по результатам работы, апробации результатов на научных конференциях, в формулировке выводов по результатам исследования.

Положения, выносимые на защиту:

1. Доказательство того, что наличие нановыступов на поверхности металла способно увеличить порог тыльного откола по отношению к импульсам ударного сжатия пикосекундной длительности из-за ослабления отраженной волны растяжения вследствие интенсивной пластической деформации выступов. Увеличение порога может достигать 40% по амплитуде ударной волны и является наибольшим при сопоставимости высоты нановыступов и ширины импульса сжатия, а также при отношении поперечного сечения выступа к общей площади поверхности порядка 0,3-0,4.

2. Заключение о том, что осажденные на поверхность металла наночастицы повышают порог откольного разрушения по отношению к пикосекундным импульсам ударного сжатия. Наиболее сильно на величину эффекта влияет размер ближайших к поверхности наночастиц. Максимальный эффект наблюдается при соприкосновении соседних столбцов наночастиц, то есть при плотном покрытии поверхности наночастицами.

3. Развитие неустойчивости Рихтмайера-Мешкова при большой высоте (превышающей ширину импульса сжатия) или площади поперечного сечения нановыступов, а также при большом диаметре наночастиц ограничивает увеличение порога тыльного откола. Неустойчивость приводит к нарушению целостности мишени за счет выброса струй вещества.

4. Заключение о том, что воздействие последовательных импульсов ударного сжатия на поверхность подложки со слоем наночастиц, удерживаемых адгезией, может привести к постепенному компактированию слоя в наноструктурное покрытие. Отсутствие выброса наночастиц связано с действием силы адгезии и развитием интенсивной пластической деформации под действием импульса ударного сжатия.

5. Результаты МД моделирования ударно-волнового компактирования наночастиц меди с диаметрами 6 нм и 12 нм и наночастиц никеля диаметром 6 нм. Для создания необходимого ударно-волнового нагружения можно использовать серии последовательных субпикосекундных импульсов мощного лазерного излучения, действующего на поверхность подложки, противоположную наночастицам.

Апробация работы. Результаты, изложенные в диссертации, были представлены и обсуждены на следующих научных конференциях: 29th Nordic Seminar on Computational Mechanics (Гётеборг, Швеция, 2016), VI Всероссийской конференции по наноматериалам (Москва, 2016), XXXI International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2016), 21st European Conference on Fracture (Катания, Италия, 2016), XXXII International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2017), LVIII международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Пермь, 2017), 14th International Conference on Fracture (Родос, Греция, 2017), LIX международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (Тольятти, 2017), 1st ECCOMAS Thematic Conference on Simulation for Additive Manufacturing (Мюнхен, Германия, 2017), 30th Nordic Seminar on Computational Mechanics (Копенгаген, Дания, 2017).

Публикации. Результаты, приведенные в диссертации, опубликованы в 13 работах, из которых 3 публикации в изданиях рекомендованных ВАК РФ для публикации результатов диссертационных работ и приравненных к ним [A1-A3], 1 глава в монографии [A4], 9 тезисов и статей в сборниках трудов и докладов международных и всероссийских научных конференций [A5-A13].

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка авторских публикаций по теме диссертации и списка цитируемой литературы. Объем диссертационной работы составляет 162 страницы, включая 43 рисунка, 7 таблиц, и 173 источников в списке цитируемой литературы.

Содержание работы

Во **введении** приведено обоснование актуальности темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи исследования, указаны используемые методы исследования, приведены положения, выносимые на защиту, отмечены научная новизна и практическая значимость исследования, также приведены сведения о структуре диссертации, публикациях и апробации работы.

В **первой главе** представлен обзор литературных данных, в котором описаны метод молекулярной динамики, потенциалы межатомного взаимодействия, ударные волны в твердых телах, откольное разрушение металлов при ударном воздействии, ударно-волновое компактирование нанопорошков, молекулярно-динамические исследования ударно-волновых явлений в конденсированных средах. Обзор литературы показывает, что к настоящему времени отсутствуют работы по исследованию влияния на откольную прочность нанорельефа или осажденных наночастиц на свободной поверхности. Такое влияние может иметь место в результате ослабления отраженной волны растяжения за счет потерь энергии падающей ударной волны на пластическую деформацию элементов нанорельефа. Также отсутствуют исследования возможности ударно-волнового компактирования нанопорошка в открытых условиях без удерживающего контейнера, например наночастиц, нанесенных на поверхность тонкой металлической фольги. При уменьшении размеров частиц сила адгезии может стать достаточной, чтобы предотвратить разлет наночастиц без использования контейнера.

Во **второй главе** приведены результаты МД исследования высокоскоростного соударения для медных и алюминиевых образцов, показывающие, что наличие на тыльной поверхности образца наноразмерных выступов способно существенно увеличить порог тыльного откола по отношению к импульсам сжатия пикосекундной длительности. Причина состоит в том, что при выходе ударной волны на тыльную поверхность с выступами начинается разгрузка на боковой поверхности выступов, приводящая к интенсивной пластической деформации. В результате, часть энергии импульса сжатия расходуется на пластическую деформацию, что ограничивает амплитуду импульса растяжения (рис. 1) и подавляет разрушение вещества (рис. 2). Рассчитанное значение откольной прочности для плоской поверхности меди соответствует экспериментальным данным [46]. Эффект увеличения порога может достигать сотен метров в секунду по скорости соударения и десятков гигапаскалей по амплитуде падающей ударной волны (рис. 3). Увеличение порога является существенным при условии сопоставимости высоты выступов и ширины импульса сжатия (толщины ударника). Другим условием является отношение поперечного сечения выступа к общей площади поверхности, которое не должна быть ни малым, ни большим, в лучшем случае около 0,3-0,4. При высокой скорости соударения и большой высоте или площади поперечного сечения выступов на тыльной поверхности развивается неустойчивость Рихтмайера-Мешкова, сопровождающаяся выбросом струй вещества аналогично [11-13]. Развитие неустойчивости ограничивает увеличение порога разрушения при высотах выступа больше ширины импульса сжатия. Анализ распределения сдвиговой деформации и температуры в образце (рис. 4) показывает, что максимальная степень деформации и максимальный нагрев наблюдаются в тех частях нанорельефа, для которых наблюдается наибольшее изменение формы. Максимальная температура достигает температуры плавления, но явных следов плавления не обнаруживается, что, возможно, связано с быстротой протекающих процессов.

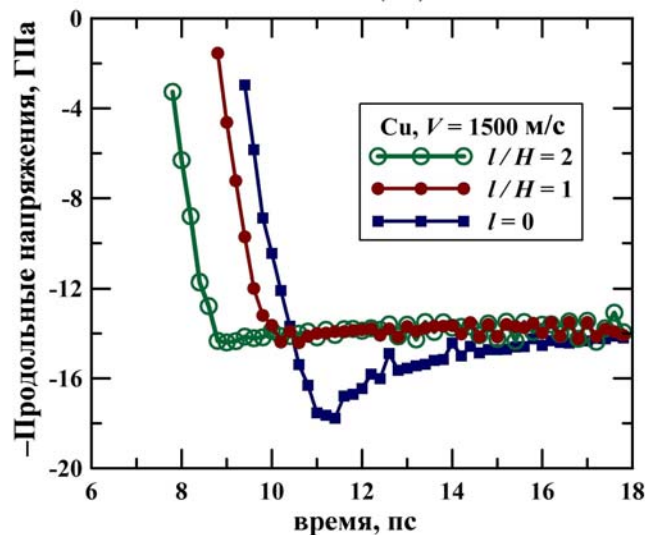


Рис. 1. Амплитуда продольных напряжений в отраженной волне растяжения как функция времени. Медные мишень и ударник, скорость ударника 1500 м/с, полная толщина мишени $L = 44$ нм; плоская тыльная поверхность, а также цилиндрические выступы с высотой l , равной толщине ударника H и вдвое большей толщины ударника.

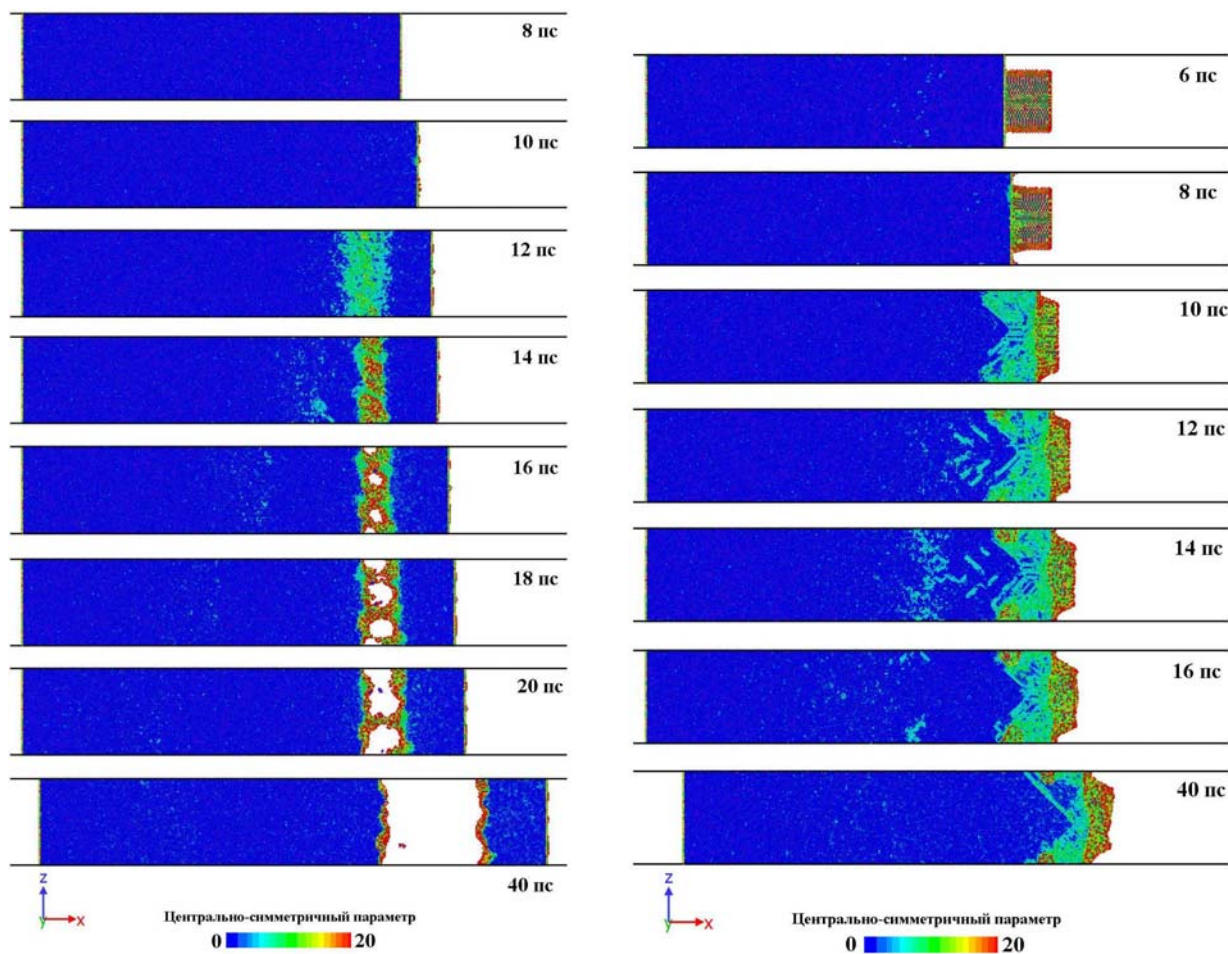


Рис. 2. Эволюция МД системы (для меди) в случае плоской поверхности (слева) и при наличии цилиндрического выступа с высотой, равной толщине ударника ($l/H = 1$) (справа) при скорости ударника 1500 м/с и полной толщине мишени $L = 44$ нм; атомы окрашены в соответствии с x проекцией скорости (а) и значением центрально-симметричного параметра (б).

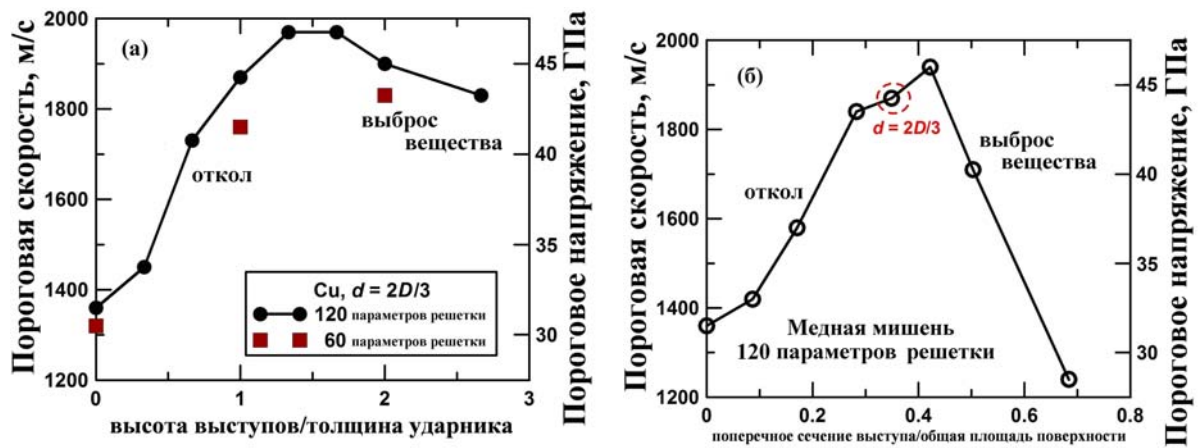


Рис. 3. Зависимость пороговой скорости соударения (левая шкала) и соответствующей амплитуды ударной волны (правая шкала), приводящих к отколу, от отношения высоты выступов к толщине ударника l/H (а) и отношения площади поперечного сечения выступа $\pi d^2/4$ к полной площади поверхности D^2 (б); значения $l/H = 0$ и $d = 0$ соответствуют плоской тыльной поверхности.

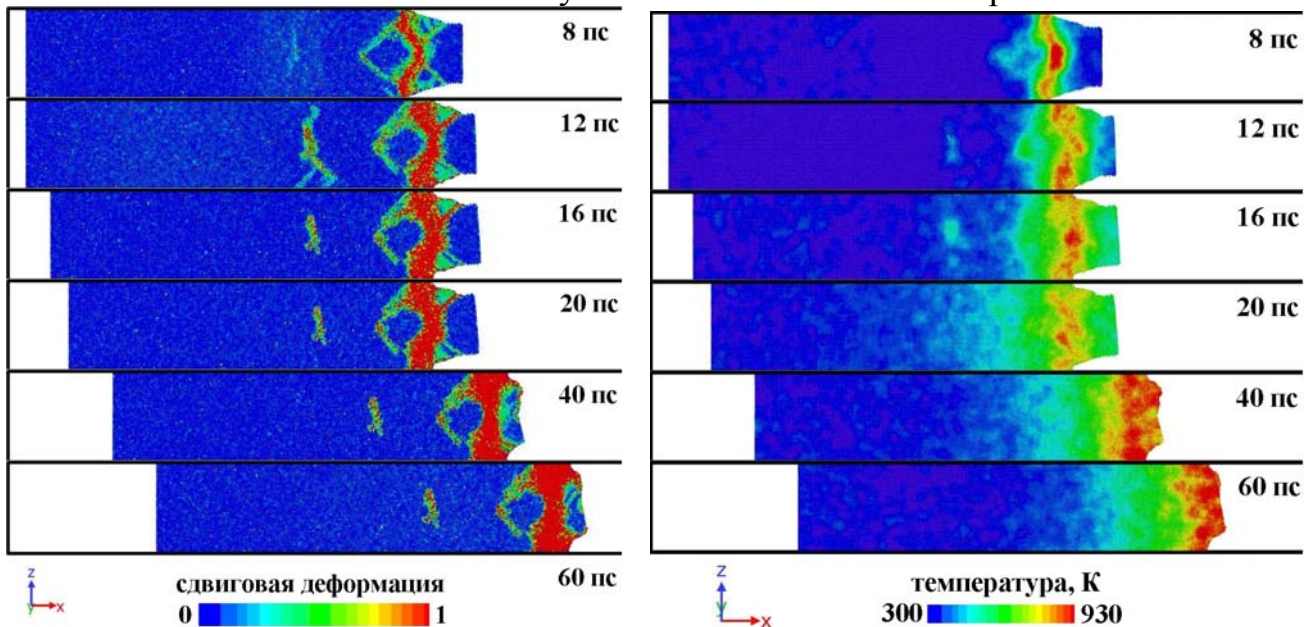


Рис. 4. Сдвиговая деформация (слева) и температура (справа) в центральном сечении алюминиевой мишени с цилиндрическими выступами с $l/H = 1$; при скорости ударника 1500 м/с и полной толщине мишени $L = 44$ нм.

В третьей главе приведено МД исследование высокоскоростного соударения для алюминиевых и медных образцов, показывающее, что осажденные наночастицы делают свободную поверхность более стойкой по отношению к откольному разрушению, инициированному отражающимся импульсом сжатия пикосекундного диапазона длительности. Наблюдается сильная деформация наночастиц при выходе ударной волны на тыльную поверхность с осажденными наночастицами (рис. 5). Аналогично случаю нановыступов, амплитуда отраженного импульса растяжения ограничена из-за расходования части энергии импульса сжатия на пластическую деформацию (рис. 6), вследствие этого ограничивается и подавляется разрушение вещества в растягивающих напряжениях.

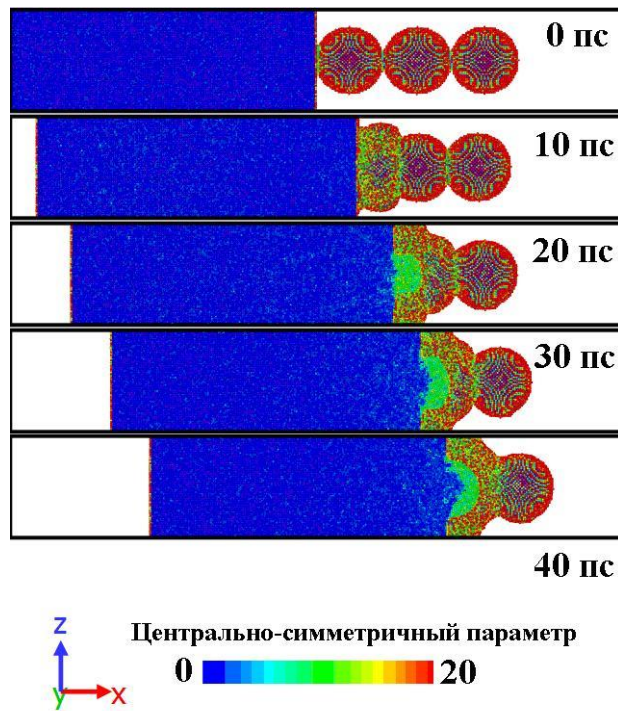


Рис. 5. Эволюция МД системы (для алюминия) при наличии осажденных частиц диаметра 8,1 нм (три слоя) с общей толщиной вдвое большей толщины ударника, при скорости ударника 1300 м/с и полной толщине мишени 48,6 нм; приведено распределение центрально-симметричного параметра.

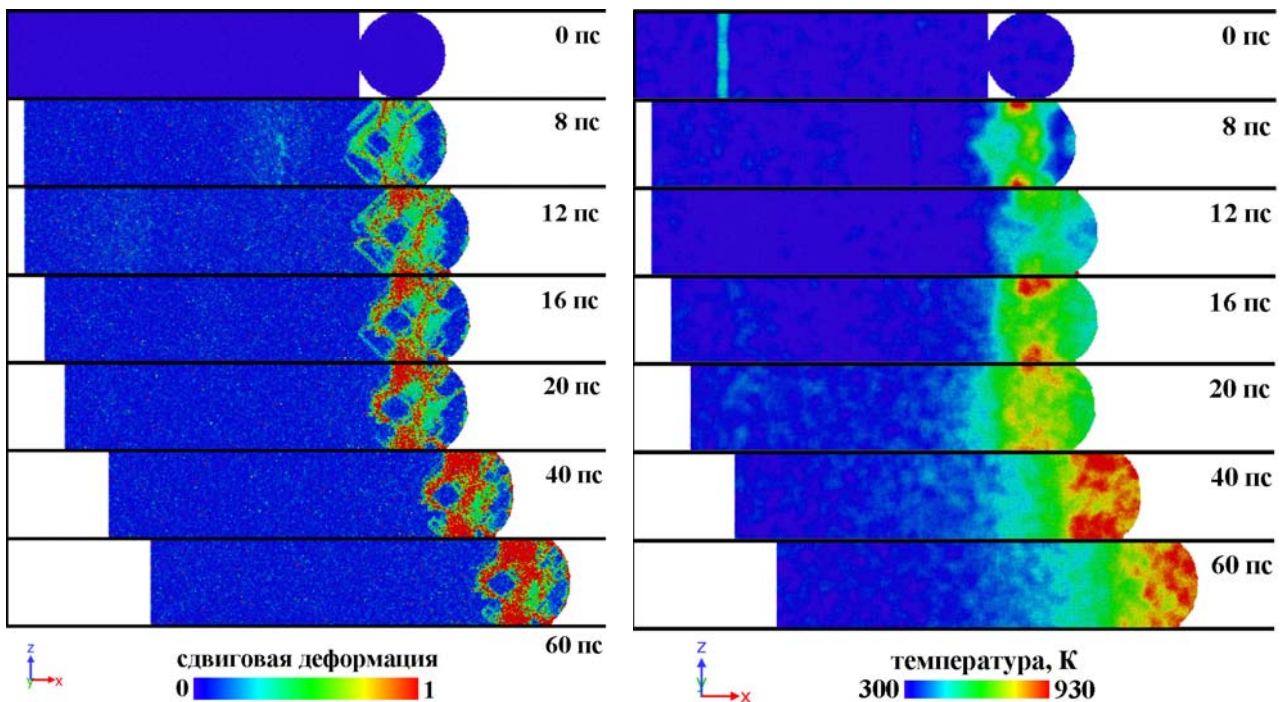


Рис. 6. Сдвиговая деформация (слева) и температура (справа) в центральном сечении алюминиевой мишени с осажденными частицами с диаметром 12,15 нм, один слой; при скорости ударника 1500 м/с и полной толщине мишени 48,6 нм.

Наиболее сильно на увеличение порога откола влияет размер первого, самого близкого к поверхности слоя наночастиц. Наибольший эффект упрочнения наблюдается при равенстве диаметра наночастиц поперечному сечению МД системы, то есть, с учетом периодических граничных условий, при соприкосновении соседних столбцов частиц. В этом случае нарушение целостности тыльной поверхности мишени происходит в основном за счет развития неустойчивости Рихтмайера-Мешкова, сопровождающейся выбросом струй вещества (рис. 7).

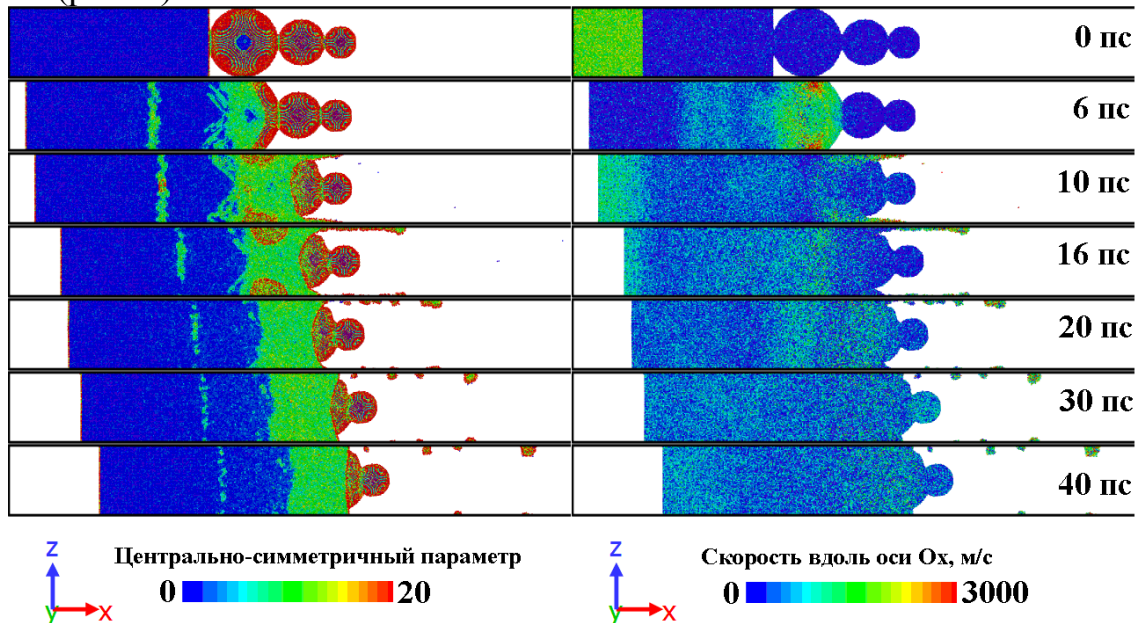


Рис. 7. Развитие неустойчивости на поверхности алюминия с осажденными наночастицами; общая толщина мишени 48,6 нм (включая наночастицы); поперечный размер и толщина ударника 12,15 нм; скорость удара 1800 м/с; приведено распределение центрально-симметричного параметра (слева) и продольной составляющей скорости атомов (справа).

В четвертой главе показано, что воздействие последовательных импульсов ударного сжатия на поверхность подложки со слоем наночастиц, удерживаемых адгезией, может привести к постепенному компактированию слоя в наноструктурное покрытие (рис. 8, 9); изучены ход и общие закономерности процесса компактирования. Отсутствие выброса наночастиц связано с высоким значением силы адгезии, которая позволяет наночастицам оставаться присоединенными друг к другу и к подложке, когда они компактируются импульсом ударного сжатия. Отсутствие выброса вещества должно зависеть от размера наночастиц, поскольку силы инерции должны превышать силы адгезии для достаточно больших наночастиц и вызывать разлет наночастиц под действием ударной волны. Определение соответствующего порогового диаметра является темой для будущих исследований; в диссертации продемонстрирована возможность уплотнения для наночастиц меди с диаметрами 6 и 12 нм и наночастиц никеля диаметром 6 нм. Интенсивная пластическая деформация наночастиц и повышенная температура из-за схлопывания пустот между наночастицами облегчают их компактирование в монолитный слой.

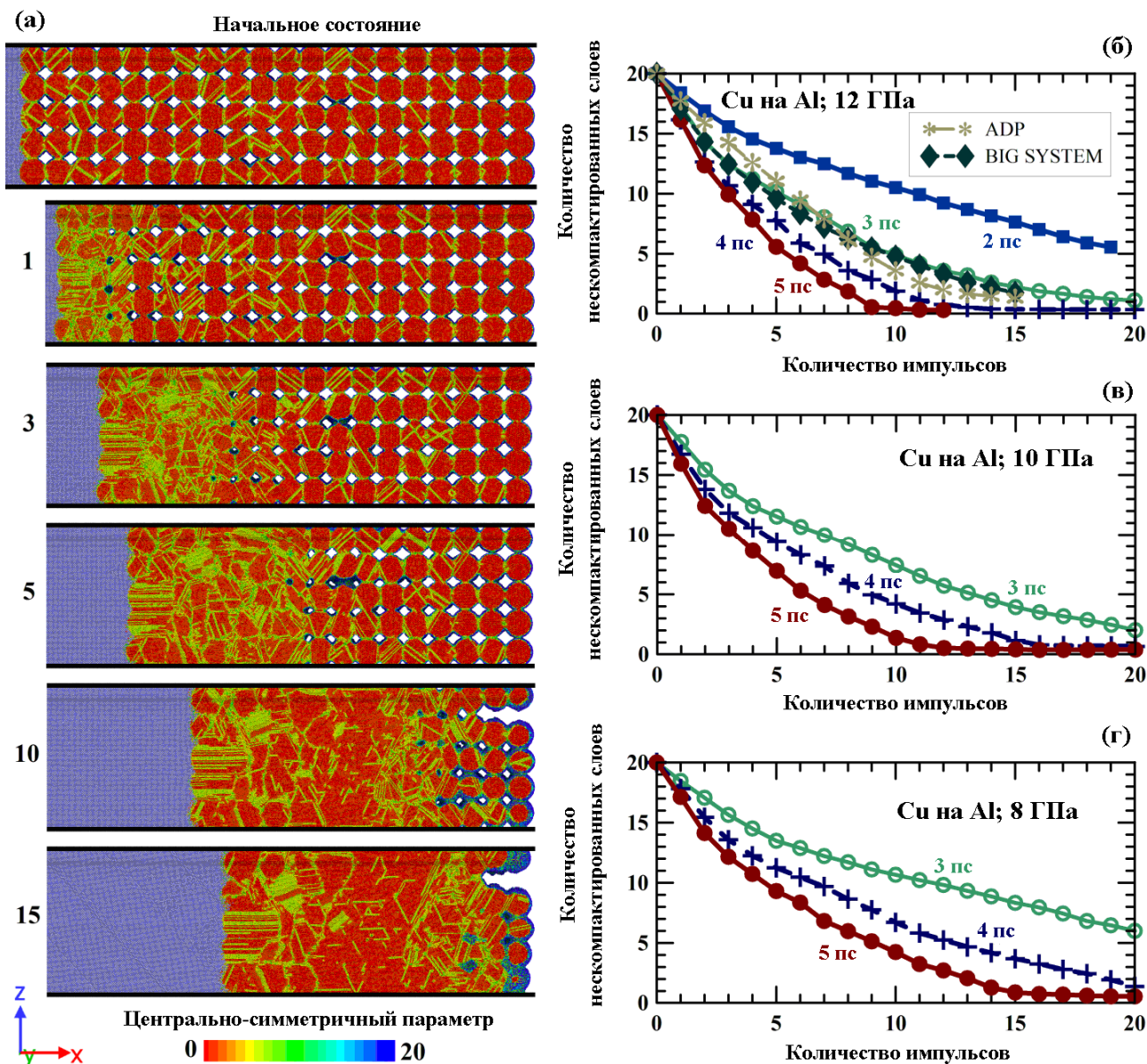


Рис. 8. Воздействие последовательных импульсов сжатия: наночастицы меди на алюминиевой подложке. (а) показывает МД систему в начальном состоянии (сверху) и после количества импульсов, указанных слева. Показано распределение центрально-симметричного параметра, атомы алюминия слева показаны одним цветом; на рисунке показано центральное поперечное сечение МД системы. Амплитуда каждого импульса сжатия составляет 12 ГПа, длительность – 3 пс. На (б-г) показано уменьшение оставшихся некомпактированными слоев с увеличением числа импульсов сжатия при амплитудах импульсов 12 ГПа (б), 10 ГПа (в) и 8 ГПа (г), а длительность импульса варьируется от 2 до 5 пс. На (б) для длительности импульса 3 пс дополнительно представлены результаты расчетов с потенциалом ADP [47], а остальные вычисления выполнены с более простым потенциалом EAM [48]; также представлены результаты расчетов для большой системы (“BIG SYSTEM”), содержащей 5×5 столбцов наночастиц, остальные вычисления выполняются для системы, содержащей один столбец наночастиц. Оба сравнения выполняются для амплитуды ударной волны 12 ГПа и длительности импульса сжатия 3 пс.

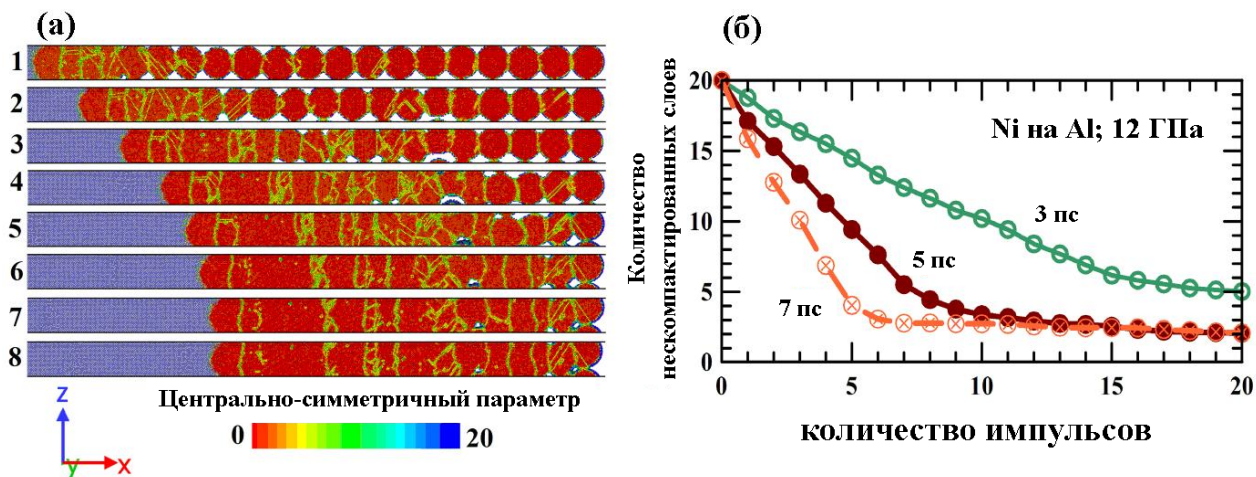


Рис. 9. Компактирование наночастиц никеля на алюминиевой подложке. (а) показывает состояние МД системы после количества импульсов ударного сжатия, указанных слева; показано распределение центрально-симметричного параметра, характеризующего степень дефектности в никеле; атомы алюминия слева показаны одним цветом; центральное поперечное сечение МД системы. Амплитуда каждого импульса сжатия составляет 12 ГПа, длительность – 7 пс. (б) показывает уменьшение количества оставшихся некомпактных слоев с увеличением числа импульсов сжатия при амплитуде импульса 12 ГПа и длительности 3 пс, 5 пс и 7 пс.

Предлагаемый метод в перспективе может использоваться для формирования наноструктурированных покрытий различных композиций. Толщина уплотненного нанокристаллического покрытия может быть локально изменена за счет изменений количества действующих импульсов.

Заключение

1. Проведено МД моделирование взаимодействия пикосекундных импульсов сжатия, возбуждаемых плоскими ударниками, с плоской и наноструктурированной тыльной поверхностью медных и алюминиевых образцов. Показано, что наличие нановыступов на тыльной поверхности повышает пороговое значение скорости соударения, приводящей к тыльному отколу. При выходе ударной волны на тыльную поверхность с выступами начинается разгрузка на боковой поверхности выступов, приводящая к интенсивной пластической деформации. Часть энергии импульса сжатия расходуется на пластическую деформацию, что ограничивает амплитуду волны растяжения и подавляет откольное разрушение. Увеличение порога тыльного откола является существенным при условии сопоставимости высоты выступов и ширины импульса сжатия (толщины ударника) и имеет место для всех исследованных толщин мишени.

2. Для алюминия и меди проводилось МД моделирование возникновения, распространения и взаимодействия с тыльной поверхностью с осажденными наночастицами импульсов ударного сжатия пикосекундной длительности, инициируемых наноразмерным ударником. Показано, что наличие на задней поверхности осажденных наночастиц увеличивает пороговое значение амплитуды ударной волны, вызывающей тыльный откол. Как и в случае выступов,

взаимодействие ударной волны с осажденными наночастицами приводит к интенсивной пластической деформации в поверхностном слое металла. Часть энергии импульса сжатия расходуется на пластическую деформацию, что подавляет откольное разрушение.

3. При высокой скорости соударения и высоте нановыступов, превышающей ширину импульса сжатия, на тыльной поверхности мишени развивается неустойчивость Рихтмайера-Мешкова, сопровождающаяся выбросом струй вещества, что ограничивает увеличение порога разрушения. Аналогичная ситуация имеет место для осажденных наночастиц. При больших диаметрах осажденных наночастиц порог откола существенно увеличивается, но развивается неустойчивость на задней поверхности мишени, которая сопровождается выбросом капель. Развитие неустойчивости нарушает целостность задней поверхности, хотя потеря целостности происходит через выброс вещества, без откола.

4. Рассмотрен процесс компактирования ударной волной наночастиц в нанокристаллическое покрытие. В предлагаемой схеме слои наночастиц, которые прикреплены к поверхности подложки адгезией, уплотняются плоскими сверхкороткими ударными волнами, поступающими с подложки. Первоначальная адгезия возникает самопроизвольно при любом контакте между наночастицами без предварительного сжатия. Отсутствие выброса наночастиц из-за воздействия ударной волны связано с большими силами адгезии, которые позволяют удерживать наночастицы при их компактировании; это должно быть справедливо для достаточно малых наночастиц. Интенсивная пластическая деформация наночастиц и повышенная температура из-за схлопывания пустот между ними облегчают их компактирование в монолитный нанокристаллический слой. Процесс компактирования рассмотрен на примере наночастиц меди и никеля на алюминиевой подложке.

5. Показана эффективность воздействия нескольких ударных волн с длительностью в диапазоне 2-20 пс и амплитудой в диапазоне 4-12 ГПа для последовательного послойного компактирования наночастиц. Экспериментально последовательность ударных волн может быть создана повторяющимся мощным импульсным лазерным облучением противоположной поверхности подложки. Метод в перспективе может использоваться для формирования наноструктурных покрытий различных композиций. Толщина скомпактированного нанокристаллического покрытия может быть локально изменена и контролироваться количеством действующих импульсов.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи в изданиях рекомендованных ВАК РФ для публикации материалов диссертационных работ

- A1. Mayer, A.E. Influence of free surface nanorelief on the rear spallation threshold: Molecular dynamics investigation / A.E. Mayer, A.A. Ebel // Journal of Applied Physics. – 2016. – V. 120, №16. – P. 165903.
- A2. Ebel, A.A. Molecular dynamic investigations of the shock pulses interaction with nanostructured free surface of a target / A.A. Ebel, A.E. Mayer // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – V. 774, №1. – P. 012060.

A3. Mayer, A.E. Shock-induced compaction of nanoparticle layers into nanostructured coating / A.E. Mayer, A.A. Ebel // Journal of Applied Physics. – 2017. – V. 122, №16. – P. 165901.

Тезисы и статьи в сборниках трудов и докладов международных и всероссийских научных конференций

A4. Майер, А.Е. Влияние нанорельефа свободной поверхности на порог тыльного откола / А.Е. Майер, А.А. Эбель // Динамическое разрушение при растяжении твердых и расплавленных металлов: атомистическое и континуальное моделирование: монография. – Челябинск: ИП Мякотин И.В., 2016. – С. 102–122.

A5. Mayer, A.E. Reflection of a shock pulse from a free surface of Al and Cu with nanorelief or deposited nanoparticles: molecular dynamics investigation / A.E. Mayer, A.A. Ebel // 29th Nordic Seminar on Computational Mechanics. – 2016. – P. S10-1-f.

A6. Майер, А.Е. Взаимодействие импульсов ударного сжатия с наноструктурированной поверхностью металлов / А.Е. Майер, А.А. Эбель // VI Всероссийская конференция по наноматериалам с элементами научной школы для молодежи. – 2016. – С. 184.

A7. Ebel, A.A. Molecular dynamic investigations of the shock pulses interaction with free target surface with nanostructure / A.A. Ebel, A.E. Mayer // XXXI International Conference on Equations of State for Matter. – 2016. – P. 154.

A8. Майер, А.Е. Пластическая деформация при выходе ударной волны на поверхность металла с нанорельефом или осажденными наночастицами / А.Е. Майер, А.А. Эбель // XX зимняя школа по механике сплошных сред. – 2017. – С. 206.

A9. Майер, А.Е. Атомистическое моделирование пластической деформации при отражении ударной волны от поверхности металла с нанорельефом / А.Е. Майер, А.А. Эбель // Забабахинские научные чтения. – 2017. – С. 232–233.

A10. Майер, А.Е. Интенсивная пластическая деформация нанорельефа поверхности металла при воздействии ударной волны / А.Е. Майер, А.А. Эбель // Актуальные проблемы прочности: LIX международная конференция: сб. материалов. – 2017. – С. 138.

A11. Mayer, A. Dynamic methods of nanoparticle assembly: high-velocity impact and shock-wave compaction / A. Mayer, V. Pogorelko, V. Krasnikov, A. Ebel // 1st ECCOMAS Thematic Conference on Simulation for Additive Manufacturing. – 2017. – P. 21–22.

A12. Mayer, A.E. Molecular dynamic simulation of shock-wave compaction of nanopowder in open and constrained conditions / A.E. Mayer, A.A. Ebel, M.K.A. Al-Sandoqachi // 30th Nordic Seminar on Computational Mechanics. – 2017. – P. 224–227.

A13. Майер, А.Е. Пластическая деформация наноструктурированной поверхности металла при отражении ударной волны / А.Е. Майер, А.А. Эбель // VII международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов»: сб. материалов. – 2017. – С. 258–259.

Библиографический список

1. Qian, Z. Pulsetrain-burst mode, ultrafast-laser interactions with 3D viable cell cultures as a model for soft biological tissues / Z. Qian, A. Mordovanakis, J.E. Schoenly, A. Covarrubias, Y. Feng, L. Lilge, R.S. Marjoribanks // *Biomedical Optics Express*. – 2014. – V. 5, №1. – P. 208–222.
2. Starikov, S.V. Laser ablation of gold: Experiment and atomistic simulation / S.V. Starikov, V.V. Stegailov, G.E. Norman, V.E. Fortov, M. Ishino, M. Tanaka, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Ohba, T. Kaihori, E. Ochi, T. Imazono, T. Kavachi, S. Tamotsu, T.A. Pikuz, I.Y. Skobelev, A.Y. Faenov // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2011. – V. 93, №11. – P. 642–647.
3. Inogamov, N.A. Electron-ion relaxation, phase transitions, and surface nanostructuring produced by ultrashort laser pulses in metals / N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, Yu.V. Petrov, V.A. Khokhlov, S.I. Ashitkov, K.V. Khishchenko, K.P. Migdal, D.K. Ilnitsky, Yu.N. Emirov, P.S. Komarov, V.V. Shepelev, C.W. Miller, I.I. Oleynik, M.B. Agranat, A.V. Andriyash, S.I. Anisimov, V.E. Fortov // *Contributions to Plasma Physics*. – 2013. – V. 53, №10. – 2013. – P. 796–810.
4. Ashitkov, S.I. Behavior of aluminum near an ultimate theoretical strength in experiments with femtosecond laser pulses / S.I. Ashitkov, M.B. Agranat, G.I. Kanel, P.S. Komarov, V.E. Fortov // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. – 2010. – V. 92, №8. – P. 516–520.
5. Ashitkov, S.I. Achievement of ultimate values of the bulk and shear strengths of iron irradiated by femtosecond laser pulses / S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, M.B. Agranat, G.I. Kanel, V.E. Fortov // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. – 2013. – V. 98, №7. – P. 384–388.
6. Ashitkov, S.I. Mechanical and optical properties of vanadium under shock picosecond loads / S.I. Ashitkov, P.S. Komarov, E.V. Struleva, M.B. Agranat, G.I. Kanel // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. – 2015. – V. 101, №4. – P. 276–281.
7. Kanel, G.I. Shock waves in condensed-state physics / G.I. Kanel, V.E. Fortov, S.V. Razorenov // *Physics Uspekhi*. – 2007. – V. 50, №8. – P. 771–791.
8. Kanel, G.I. Stress relaxation in vanadium under shock and shockless dynamic compression / G.I. Kanel, S.V. Razorenov, G.V. Garkushin, A.S. Savinykh, E.B. Zaretsky // *Journal of Applied Physics*. – 2015. – V. 118, №4. – P. 045901.
9. Chen, Y. Experimental study of ejecta from shock melted lead / Y. Chen, H. Hu, T. Tang, G. Ren, Q. Li, R. Wang, W.T. Buttler // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – V. 111, №5. – P. 053509.
10. Georgievskaya, A. Estimation of spectral characteristics of particles ejected from the free surfaces of metals and liquids under a shock wave effect / A. Georgievskaya, V.A. Raevsky // *AIP Conference Proceedings*. – 2012. – V. 1426, №1. – P. 1007–1010.
11. Shao, J.L. Atomistic simulations of shock-induced microjet from a grooved aluminium surface / J.L. Shao, P. Wang, A. He, S.Q. Duan, C.S. Qin // *Journal of Applied Physics*. – 2013. – V. 113, №15. – P. 153501.

12. Ren, G. Ejecta production from shocked Pb surface via molecular dynamics / G. Ren, Y. Chen, T. Tang, Q. Li // *Journal of Applied Physics*. – 2014. – V. 116, №13. – P. 133507.
13. Dyachkov, S.A. Shock-produced ejecta from tin: Comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods / S.A. Dyachkov, A.N. Parshikov, V.V. Zhakhovsky // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2015. – V. 653. – P. 012043.
14. Kuksin, A. Dynamic fracture kinetics, influence of temperature and microstructure in the atomistic model of aluminum / A. Kuksin, G. Norman, V. Stegailov, A. Yanilkin, P. Zhilyaev // *International Journal of Fracture*. – 2010. – V. 162, №1–2. – P. 127–136.
15. Stegailov, V.V. Structural transformations in single-crystal iron during shock-wave compression and tension: molecular dynamics simulation / V.V. Stegailov, A.V. Yanilkin // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2007. – V. 104, №6. – P. 928–935.
16. Dongare, A.M. Atomic scale studies of spall behavior in nanocrystalline Cu / A.M. Dongare, A.M. Rajendran, B. LaMattina, M.A. Zikry, D.W. Brenner // *Journal of Applied Physics*. – 2010. – V. 108, №11. – P. 113518.
17. Huang, L. Shock-induced consolidation and spallation of Cu nanopowders / L. Huang, W.Z. Han, Q. An, W.A. Goddard III, S.N. Luo // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – V. 111, №1. – P. 113508.
18. Fensin, S.J. Influence of grain boundary properties on spall strength: Grain boundary energy and excess volumes // S.J. Fensin, S.M. Valone, E.K. Cerreta, G.T. Gray III // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – V. 112, №8. – P. 083529.
19. Shao, J.L. Molecular dynamics study on the failure modes of aluminium under decaying shock loading / J.L. Shao, P. Wang, A. He, S.Q. Duan, C.S. Qin // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – V. 113, №16. – P. 163507.
20. Liao, Y. Molecular dynamics studies of the roles of microstructure and thermal effects in spallation of aluminum / Y. Liao, M. Xiang, X. Zeng, J. Chen // *Mechanics of Materials*. – 2015. – V. 84. – P. 12–27.
21. Mackenchery, K. Dislocation evolution and peak spall strengths in single crystal and nanocrystalline Cu / K. Mackenchery, R.R. Valisetty, R.R. Namburu, A. Stukowski, A.M. Rajendran, A.M. Dongare // *Journal of Applied Physics*. – 2016. – V. 119, №4. – P. 044301.
22. Pogorelko, V.V. Influence of copper inclusions on the strength of aluminum matrix at high-rate tension / V.V. Pogorelko, A.E. Mayer // *Materials Science and Engineering: A*. – 2015. – V. 642. – P. 351–359.
23. Pogorelko, V.V. Influence of titanium and magnesium nanoinclusions on the strength of aluminum at high-rate tension: Molecular dynamics simulations / V.V. Pogorelko, A.E. Mayer // *Materials Science and Engineering: A*. – 2016. – V. 662. – P. 227–240.
24. Krasnikov, V.S. Plasticity driven growth of nanovoids and strength of aluminum at high rate tension: Molecular dynamics simulations and continuum modeling / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2015. – V. 74. – P. 75–91.

25. Gourdin, W.H. Dynamic consolidation of metal powders / W.H. Gourdin // *Progress in Materials Science*. – 1986. – V. 30, №1. – P. 39–80.
26. Meyers, M.A. Shock consolidation: microstructurally-based analysis and computational modeling / M.A. Meyers, D.J. Benson, E.A. Olevsky // *Acta Materialia*. – 1999. – V. 47, №7. – P. 2089–2108.
27. Fredenburg, D.A. Shock consolidation of nanocrystalline 6061-T6 aluminum powders / D.A. Fredenburg, N.N. Thadhani, T.J. Vogler // *Materials Science and Engineering: A*. – 2010. – V. 527, №15. – P. 3349–3357.
28. Ahn, D.-H. Plastic deformation and microstructural evolution during the shock consolidation of ultrafine copper powders / D.-H. Ahn, W. Kim, M. Kang, L.J. Park, S. Lee, H.S. Kim // *Materials Science and Engineering: A*. – 2015. – V. 625. – P. 230–244.
29. Boltachev, G.Sh. Shock-wave compaction of the granular medium initiated by magnetically pulsed accelerated striker / G.Sh. Boltachev, N.B. Volkov, V.V. Ivanov, A.S. Kaygorodov // *Acta Mechanica*. – 2009. – V. 204. – P. 37–50.
30. Dai, C. Shock-compression response of magnetic Fe₃O₄ nanoparticles / C. Dai, N.N. Thadhani // *Acta Materialia*. – 2011. – V. 59, №2. – P. 785–796.
31. Molian, P. Laser shock wave consolidation of micropowder compacts of fully stabilised zirconia with addition of nanoparticles / P. Molian, V.R. Baerga // *Advances in Applied Ceramics*. – 2011. – V. 110, №2. – P. 120–123.
32. Beck, J. Shock-wave consolidation of nanostructured bismuth telluride powders / J. Beck, M. Alvarado, D. Nemir, M. Nowell, L. Murr, N. Prasad // *Journal of Electronic Materials*. – 2012. – V. 41, №6. – P. 1595–1600.
33. Vorozhtsov, S.A. The application of external fields to the manufacturing of novel dense composite master alloys and aluminum-based nanocomposites / S.A. Vorozhtsov, D.G. Eskin, J. Tamayo, A.B. Vorozhtsov, V.V. Promakhov, A.A. Averin, A.P. Khrustalyov // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2015. – V. 46, №7. – P. 2870–2875.
34. Kulkov, S. Structure, phase content and mechanical properties of aluminium with hard particles after shock-wave compaction / S. Kulkov, S. Vorozhtsov, I. Turuntaev // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2015. – V. 602. – P. 012019.
35. Atrian, A. Evaluation of tensile strength of Al7075-SiC nanocomposite compacted by gas gun using spherical indentation test and neural networks / A. Atrian, G.H. Majzoubi, S.H. Nourbakhsh, S.A. Galehdari, R. Masoudi Nejad // *Advanced Powder Technology*. – 2016. – V. 27, №4. – P. 1821–1827.
36. Tavakol, M. Shock wave sintering of Al/SiC metal matrix nano-composites: A molecular dynamics study / M. Tavakol, M. Mahnama, R. Naghdabadi // *Computational Materials Science*. – 2016. – V. 125. – P. 255–262.
37. Li, C. Structural evolution of nanoparticles under picosecond stress wave consolidation / C. Li, K. Burney, K. Bergler, X. Wang // *Computational Materials Science*. – 2016. – V. 95. – P. 74–83.
38. Plimpton, S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics / S. Plimpton // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – V. 117, №1. – P. 1–19.

39. Stukowski, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool / A. Stukowski // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2010. – V. 18, №1. – P. 015012.
40. Kelchner, C.L. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation / C.L. Kelchner, S.J. Plimpton, J.C. Hamilton // *Physical Review B*. – 1998. – V. 58, №17. – P. 11085.
41. Honeycutt, J.D. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters / J.D. Honeycutt, H. C. Andersen // *Journal of Physical Chemistry*. – 1987. – V. 91, №19. – P. 4950–4963.
42. Stukowski, A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials / A. Stukowski // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2012. – V. 20, №4. – P. 045021.
43. Subramaniyan, A.K. Continuum interpretation of virial stress in molecular simulations / A.K. Subramaniyan, C.T. Sun // *International Journal of Solids and Structures*. – 2008. – V. 45, №14–15. – P. 4340–4346.
44. Falk, M.L. Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids / M.L. Falk, J.S. Langer // *Physical Review E*. – 1998. – V. 57, №6. – P. 7192–7205.
45. Stukowski, A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals / A. Stukowski // *Journal of the Minerals, Metals, and Materials Society*. – 2014. – V. 66, №3. – P. 399–407.
46. Moshe, E. Experimental measurements of the strength of metals approaching the theoretical limit predicted by the equation of state / E. Moshe, S. Eliezer, Z. Henis, M. Werdiger, E. Dekel, Y. Horovitz, S. Maman, I.B. Goldberg, D. Eliezer // *Applied Physics Letters*. – 2000. – V. 76, №12. – P. 1555.
47. Apostol, F. Interatomic potential for the Al-Cu system / F. Apostol, Y. Mishin // *Physical Review B*. – 2011. – V. 83, №5. – P. 054116.
48. Cai, J. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys / J. Cai, Y.Y. Ye // *Physical Review B*. – 1996. – V. 54, №12. – P. 8398–8410.