**Звіт про науково-дослідну роботу: „ Розробка моделей та проведення спрямованого обчислювального експерименту з дослідження деформації та руйнування композитних легковагих матеріалів з керамічними, металокерамічними та металічними матрицями (наприклад, системи ТИПУ В4С-СаВ6-Sі, LаВ6-МеВ2, В4С-АІN-ТіSi2 та ін.) "**

**Мета роботи** - одержання нових знань про закономірності та механізми деформації і руйнування легковагих композитних крихких матеріалів та нанокомпозитів конструкційного та функціонального призначення при квазістатичному та ударному навантаженні шляхом комп’ютерного моделювання на макрорівні (механіка суцільного середовища і метод фазових полів), мезорівні (метод клітинних автоматів і методи фрактальної геометрії), мікрорівні (розрахунки за первинними принципами і методи молекулярної динаміки).

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2012 р.

закінчення IV кв. 2014 р.

**Керівник роботи**: Галанов Борис Олександрович, д. ф.-м.н., (Email:vvk@ipms.kiev.ua),

Картузов Валерій Васильович, к.ф.-м.н., ( Email:vvk@ipms.kiev.ua)

**Скорочений зміст висновків рецензентів**.

Рецензенти дають ПОЗИТИВНУ ОЦІНКУ роботі. Зазначають, що виконана робота спрямована на формування теоретичних засад розробки нових керамічних композиційних матеріалів у системах що забезпечують як високий рівень експлуатаційних характеристик так і легку вагу, що наразі стає важливим для реалізації цих матеріалів у деталях та вузлах сучасної техніки. Розроблено та досліджено НИЗКУ математичних моделей, які було реалізовано у пакети комп’ютерних програм, що дозволить шляхом обчислення багатьох фізико-механічних характеристик матеріалів та моделювання еволюції і структури і властивостей у базових фізико-хімічних процесах досягнути розуміння можливостей керування складовими технологій. Результати обчислювальних експериментів можуть бути використані як довідковий матеріал для широкого загалу матеріалознавців, а моделі та алгоритми імітаційного моделювання МОЖУТЬ слугувати доброю основою для використання їх для досліджень інших матеріалів означеного класу композитів.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

Розроблені моделі, алгоритми імітаційного моделювання, мультімаштабне комп’ютерне моделювання можуть бути використані для досліджень інших матеріалів означеного класу композитів. Результати обчислювальних експериментів МОЖУТЬ бути використані як довідковий матеріал для широкого загалу матеріалознавців.

Дані про реєстрацію роботи: № 0112U002308

**РЕФЕРАТ**

**Мета роботи** — одержання нових знань про закономірності та механізми деформації і руйнування легковагих композитних крихких матеріалів та нанокомпозитів конструкційного та функціонального призначення при квазістатичному та ударному навантаженні шляхом комп’ютерного моделювання на макрорівні (механіка суцільного середовища і метод фазових полів), мезорівні (метод клітинних автоматів і методи фрактальної геометрії), мікрорівні (розрахунки за первинними принципами і методи молекулярної динаміки). **Об’єкт дослідження** — композитні легковагі матеріали з керамічними, металокерамічними та металічними матрицями. Отримані результати: розроблено, досліджено та реалізовано у пакети комп’ютерних програм низку математичних моделей які з достатньою адекватністю відображають процеси формування структури, деформації та руйнування досліджуємого класу матеріалів. Спираючись на розроблені та аттестовані на модельних задачах пакети комп’ютерних програм (інколи імплементовані у загальновідомі пакети для наукових розрахунків) проведено значний об’єм спрямованих обчислювальних експериментів з дослідження властивостей означених матеріалів та їх поведінки у екстремальних умовах експлуатації.

**Ключові слова**: КОМПОЗИТНІ КЕРАМІЧНІ МАТЕРІАЛИ, КРИСТАЛІЗАЦІЯ, ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, ФРАКТАЛЬНА РОЗМІРНІСТЬ, МЕТОД КЛІТИНКОВИХ АВТОМАТІВ.

**Публікації**

Закарян Д.А, Картузов В.В., Хачатрян А.В. Ab initio вычисление коэффициентов термического расширения боридов МеВ2 (Me - Ті, Zr), LaB6 , и эвтекических композитов LaB6 – МеВ2 // Порошковая металлургия.- 2012.- №5/6. -С. 65-72.

Закарян Д.А. Исследование фазового равновесия в системе жидкость - твердое тело квазибинарных эвтектических композитов // Доповіді НАНУ. 2012. № 6.- с. 95-100.

Хачатрян А. В. Ab initio обчислення механічних характеристик LaB6 та МеВ2 (Me - Ті, Zr, Hf) // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. - К.: Ин-т проблем материаловедения НАН Украины. - 2012. - Вып. 14.-С. 47-51.

Роговой Ю.Л. Температурна залежність термічного розширення диборидів // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. - К.: Ин-т проблем материаловедения НАН Украины. - 2012. - Вып. 14. - С. 30-34.

Lisenko А.А, Bekenev V.L., Ogorodnikov V.V., Kartuzov V.V. Computer simulation of high entropy multi-component alloys within cluster approach // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. - К.: Ин-т проблем материаловедения НАН Украины. - 2012. - Вып. 14. - С. 134-143.

Borodich F.M. (UK, Cardiff University), Galanov B.A. Evaluation of adhesive and elastic properties of materials by depth-sensing indentation of spheres. Appl Phys A (2012) 108:13 - 18.

Бородич Ф.М. (UK, Cardiff University), Галанов Б.А., Простов Ю.И. (MIREA - Technical University, Russia), Суарес-Алварес M.M. (MIREA - Technical University, Russia). Влияние полного сцепления на вдавливание жесткого конуса в упругое полупространство при наличии молекулярной адгезии. Прикладная математика и механика (ПММ) т.76, в. 5,2012, С.744-753.

Барановская Л.В., Картузов В.В. Решение методом потенциалов задачи Стефана в модели формирования волокнистых композитов по технологии направленной кристаллизации. I. // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. - К.: Ин-т проблем материаловедения НАН Украины. - 2012. - Вып. 14.-С. 52-60.

O.Yu. Khyzhun (від. 58), V.L. Bekenev, M.V. Karpets (від. 58), I.Yu. Zavaliy (Physico- Mechanical Institute, National Academy of Sciences of Ukraine). First-principles FP- LAPW calculations and X-ray spectroscopy studies of the electronic structure of Zr3V30 and Zr3V3O0.6 oxides // Journal of Physics and Chemistry of Solids 73 (2012) 1302- 1308.

Галанов Б.А., Иванов C.M., Картузов B.B. Продольные колебания длинных упругих ударников при ударном проникании их в преграду // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. - К.: Ин-т проблем материаловедения НАН Украины. - 2012. - Вып. 14. - С. 70-77.

Бекенев B.B., Картузов. Компьютерная инженерия поверхности раздела в нанокомпозите LaB6-Zr(Ti)B2 // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Киев: ИПМ им. И.Н.Францевича НАН Украины, 2013, вып. 15, С. 30-35.

В.В. Огородников, О.Н. Григорьев, В.Л. Бекенев, В.В. Картузов. Межатомные потенциалы взаимодействия для особотугоплавких соединений // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Киев: ИПМ им. И.Н.Францевича НАН Украины, 2013, вып. 15, 86-97.

Ю.И. Роговой, В.В. Картузов, В.В.Огородников. Термическое расширение кубических мононитридов и связей металл-металл и металл-азот // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Киев: ИПМ им. И.Н.Францевича НАН Украины, 2013, вып. 15, С. 98-104.

Закарян Д.А. Прочностные характеристики материалов в системе LаВ6 – МеВ2(Ме - Ті, Zr, Нf) // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Киев: ИПМ им. И.Н.Францевича НАН Украины, 2013, вып. 15.