**Звіт про науково-дослідну роботу: „ Моделювання та обчислювальний експеримент в дослідженні фізико-механічних властивостей, властивостей інтерфейса та структуроутворення в гетерофазних композитах, включаючи евтектичні”**

**Мета роботи** — одержання нових знань про закономірності формування фізико-механічних властивостей, властивостей інтерфейса та структуроутворення в гетерофазних композитних матеріалів конструкційного та захисного призначення; в вивченні та дослідженні механізмів деформації і руйнування цих матеріалів при квазістатичному та ударному навантаженні, при температурних впливах і дії агресивних середовищ.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2015 р.

закінчення IV кв. 2017 р.

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

**Скорочений зміст висновків рецензентів.**

Рецензенти дають позитивну оцінку роботі. Зазначають, що дослідження виконано на усій шкалі структурних рівней за чіткою схемою підготовки, проведення та аналізу результатів спрямованого обчислювального експерименту. Робота багатопланова. Її результати зафіксовані у висновках є дуже вагомими як для фізики твердого тіла так і практичного матеріалознавства. Низку цікавих результатів отримано шляхом першопринципних розрахунків та молекулярно-динамічним моделюванням. Атомний рівень досліджуємих процесів доведено до вирішення конкретних задач розробки нових матеріалів. Дуже вагомий перелік публікацій за темою мають високий науковий рівень. Це дає підставу для їх схвалення і рекомендації продовження цього напрямку досліджень.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

Розроблені моделі, алгоритми, програми 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: 0115U002253

**РЕФЕРАТ**

**Об’єкт дослідження** — гетерофазні композитні матеріали конструкційного та захисного призначення в т.ч. евтектичні.

**Мета роботи** — одержання нових знань про закономірності формування фізико-механічних властивостей, властивостей інтерфейса та структуроутворення в гетерофазних композитних матеріалів конструкційного та захисного призначення; в вивченні та дослідженні механізмів деформації і руйнування цих матеріалів при квазістатичному та ударному навантаженні, при температурних впливах і дії агресивних середовищ.

**Методи дослідження** — фізико-математичне та комп’ютерне моделювання на макрорівні (механіка суцільного середовища і метод фазових полів), мезорівні (методи фрактальної геометрії), мікрорівні (першопринципні розрахунки і методи молекулярної динаміки). Отримані результати: розроблено сукупності моделей для визначення властивостей, закономірностей та механізмів руйнування гетерофазних композитних матеріалів конструкційного і функціонального призначення при квазістатичному та ударному навантаженні шляхом комп’ютерного моделювання на макрорівні, мезорівні, мікрорівні. Проведено серії спрямованих обчислювальних експериментів з дослідження властивостей означених матеріалів та їх поведінки у екстремальних умовах експлуатації. **Ключові слова:** МОДЕЛЬ, ГЕТЕРОФАЗНІ КОМПОЗИТНІ МАТЕРІАЛИ, ІНТЕРФЕЙС ФАЗ, ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ, ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛ, КРИСТАЛІЗАЦІЯ, КОНТАКТНА ВЗАЄМОДІЯ, ТЕОРІЯ ФАЗОВИХ ПОЛІВ, АДГЕЗІЯ.

**публікації**

1. В.Л. Бекенев, С.М. Зубкова. Электронная структура поверхности CdTe(111)*A*−(2x2) // Физика твердого тела, 2015, том 57, вып. 9, c. 1830-1838.
2. Закарян Д.А., Картузов В.В., Хачатрян А.В. Эмпирические расчётные формулы для определения характерных параметров эвтектики в квазибинарных металлокерамических системах // Доповіді НАН України. 2015.- №1. - С. 87-90.
3. Закарян Д.А., Картузов В.В., Хачатрян А.В. Модель квазигрмонического приближения в теории псевдопотенциалов // Доповіді НАН України. 2015.- №11. - С. 107-112.
4. Закарян Д.А.Частичная квазибинарная эвтектика в системе B4C – SiC // Доповіді НАН України. 2015.- №10. - С. 95-99.
5. Закарян Д.А., Картузов В.В., Хачатрян А.В. Межфазные границы и энергии поверхности раздела фаз в квазибинарных боридных и металлокерамических эвтектических системах// Порошковая металлургия.- 2015.- №7/8. –С. 144-150.
6. Кириченко О.В., Клименко В.Н., Шаповал И.В., Валеева И.К. Фильтрующие свойства пористых материалов из тонких волокон коррозионностойкой стали / Порошковая металлургия. №3/4, 2015р. –С.34-39.
7. И.Е.Красикова, В.В.Картузов, И.В.Красиков.  Применение средств распараллеливания вычислений в реализации алгоритма вычисления фрактальной размерности двумерных изображений // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. – К.: ИПМ НАН Украины. – 2015. – Вып. 17. С. 75-80.
8. Григорьев О.Н., Ковальченко А.М., Галанов Б.А. Абразивный и адгезионный износ хрупких материалов. Трибоэнциклопедия.Т.1, Раздел 1, Теория трения и изнашивания. 2016, с. 121 – 133.
9. Д.А. Закарян, В.В. Картузов, А.В. Хачатрян. Модель квазигармонического приближения в теории псевдопотенциалов // Доповіді НАН України -2016, №4. –с. 55-61.
10. Закарян Д.А. Роль межфазного взаимодействия в теории квазибинарны эвтектик // Доповіді НАН Украини.-2016.- №12. - С. 50-56.
11. Галанов Б. А., Мильман Ю. В. Ивахненко С. А., Супрун Е. М., Чугунова С. И.), Голубенко А. А., Ткач В. Н., Литвин П. М., Воскобойник И. В. Усовершенствованная ядерная модель индентирования и ее применение для измерения твердости алмаза // Сверхтвердые материалы, 2016, № 5, C. 3 – 24.
12. Oleksiy Bystrenko, Valery Kartuzov. Computer simulations of the interface zone structure in binary eutectic. <https://arxiv.org/abs/1608.05472>.
13. И.Е. Красикова, И.В. Красиков, В.В. Картузов. Корреляция значений фрактальных характеристик структуры материала по электронно-микроскопическим фотографиям поверхности образцов со значениями их физико-механических характеристик // Электронная микроскопия и прочность материалов. Труды ИПМ НАН Украины. – 2016. – Вып. 22. с. 15-18.
14. М. Д. Бега, В. Б. Винокуров, Б. О. Галанов, О. М. Григор'єв, В. В. Картузов, П. В. Мазур, Н. М. Роженко, А. В. Степаненко // Электронная микроскопия и прочность материалов. Труды ИПМ НАН Украины. – 2016. – Вып. 22. с. 31-35.
15. Красикова И. Е., Картузов В. В., Красиков И. В. Компьютерная реализация алгоритма определения мультифрак­тальных характеристик материаловедческих структур по их двумерным изображениям // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. – К.: ИПМ НАН Украины. – 2016. – Вып. 18. С. 30-36.
16. Галанов Б.А., Дуб С.Н. Критические комментарии к методике Оливера-Фара для измерения твердости и упругого модуля посредством инструментального индентирования и уточнение ее базисных соотношений / Сверхтвердые материалы, 2017, № 6, С.3 -24.
17. Галанов Б.А., Иванов С.М., Картузов В.В. Модифицированная ядерная модель Джонсона для єкспериментального индентирования материалов // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. – К.: ИПМ НАН Украины. – 2017. – Вып. 19. С. 3 - 24.
18. И.Е. Красикова, В.В. Картузов, И.В. Красиков. Компьютерная реализация алгоритма определения мультифрактальных характеристик материаловедческих структур по их двумерным изображениям. // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. – К.: ИПМ НАН Украины. – 2017. – Вып. 19. С. 99 - 104.
19. И.Е. Красикова, И.В. Красиков, В.В. Картузов. Определение мультифрактальных характеристик изображений структур материалов // Межвузівський збірник «Наукові нотатки», Луцьк, 2017. Випуск №57. С.102-110.
20. Galanov B.A., Kartuzov V.V., Ivanov S.M. A Model for Penetration Resistance in Brittle Materials Taking Into Account Strain Hardening of Solid Phase in Mescal-Zone Powder Material. Procedia Engineering 103 ( 2015 ) 135 – 142.
21. Using computation parallelization facilities in the 2D-image fractal dimension evaluation algorithm И.Е. Красикова, В.В. Картузов, И.В. КрасиковInternational Journal of Open Information Technologies Vol 3, No 12 (2015), PP.7-12.
22. Zakarian D., Kartuzov V., Khachatrian A. Theoretical Strength of Borides and Quasibinary Boride Eutectics at High Temperatures //Powder Metallurgy and Metal Ceramics: Volume 54, Issue 3 (2015), Page 210-214.
23. V.V. Atuchin, O.Y. Khyzhun (dep. 47), V.L. Bekenev, L.D. Pokrovsky, Yu.A. Borovlev, V.N. Zhdankov. Low Thermal Gradient Czochralski growth of large CdWO4 crystals and electronic properties of (010) cleaved surface. Journal of Solid State Chemistry 236(2016)24–31.
24. Galanov B.A. ,Valeeva I.K. Sliding adhesive contact of elastic solids with stochastic roughness // International Journal of Engineering Science 101 (2016) 64–80.
25. Borodich F.M., Galanov B.A. Contact probing of stretched membranes and adhesive interactions: graphene and other two-dimentional materials. Proc. R. Soc. A 472: 20160550. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.2016.0550>.
26. Zakarian D., Kartuzov V., Khachatrian A Prediction of the Mechanical Properties of LaB6–ZrB2 Materials in View of the Effect of Their Intercomponent Boundaries Journal   
    Strength of Materials, -2016, 48(2), P. 290-293 DOI 10.1007/s11223-016-9764-1
27. D. Zakarian, V. Kartuzov, A. Khachatrian .Ultimate strength of crystals, nanoparticles and nano-ceramics having diamond-like structure // AIMS Materials Science, 2016, 3(4): 1696-1703. oi: 10.3934/matersci.2016.4.1696.
28. Prikhna Т.А., Barvitskiy P.P., Karpets М.V., Muratov V.B., Sverdun V.B., Haber R., Kartuzov V.V., Moshchil V.Е., Dub S.N., Loshak М.G., Alexandrova L.I., Kovylaev V.V., Garbuz V.V., Marchenko A.A. Structure and properties of superhard materials based on aluminum dodecaboride α-AlB12 // *Journal of Superhard Materials*.
29. Zakarian D. Modulus of Elasticity of LaB6 –MeB2 (Me- Ti,Zr,Hf) Compozite at High Temperatures based on the Interfacial interaction / D. Zakarian, A. Khachatrian // J. Global (GISFR). – 2017.- Volume 17.- Issue 1. P. 27-30.
30. Zakarian D. The temperature dependences of elastic modulus of composites LaB6 - MeB2 / D. Zakarian, A. Khachatrian //JOJ Materials Science-2017.-V.2.-Issue 1. P. 11-15.
31. Zakarian D. Isoalation the Influence of the Size Factor on the Eutectic Temperature and the Concentracion of binary Composites//JOJ Materials Science-2017.-V.2.-Issue 3. P. 13-14.
32. Kartuzov, V.V. & Bystrenko, O.V. Simulating the Solidification of Boride–Boride Eutectics Powder Metall Met Ceram (2017) 56: 355. https://doi.org/10.1007/s11106-017-9902-8.
33. Bystrenko, O.V Kartuzov, V.V. Interface structure and contact melting in AgCu eutectic. A molecular dynamics study. Mater. Res. Express (2017) https://doi.org/10.1088/2053-1591/aa9b63.
34. Zakarian D., Kartuzov V., Khachatrian A. Temperature and concentration dependence of the mechanical properties of boride composites with the influence of the interactions between the constituent parts//EURO PM 2015 Congress, France4-7 October, 2015, P.1-6.
35. I.Valeeva. Measuring of mechanical properties of hard materials using indentation data. Тезисы 2015 Fall Symposium of European Materials Research Society, Sep 15, 2015.
36. V.L. Bekenev, V.V. Kartuzov, E.V. Kartuzov. Influence of replacement of zirconium with titanium in eutectic LaB6–TixZr1−xB2 on power characteristics of interface. The 5th International Workshop on Directionally Solidified Eutectic Ceramics (DSEC V). Warsaw, Poland. April 3-7 of 2016.
37. Galanov B.A. ,Valeeva I.K. Adhesive contact of rough elastic solids. The 4th International Conference "Nanotechnologies" (NANO – 2016) October 24 – 27, Tbilisi: Tech. Univ. Press, Georgia, 2016, P. 65.
38. O.Bystrenko, T.Bystrenko. Anomalous Diffusion in CTRW Model and in Irregular Potential Fields. A Molecular Dynamics Study. Bogolyubov Conference Modern Problems of Theoretical Physics, May 24-26, 2016 Kyiv, Ukraine.
39. O.Bystrenko, V.Kartuzov. Pre- and contact melting phenomena in binary eutectic. Computer simulations of the inter-phase zone structure. 7th International Conference PHYSICS OF LIQUID MATTER: MODERN PROBLEMS, May 27-30, 2016, Kiev Ukraine.
40. O. Bystrenko, V. Kartuzov. Computer simulations of the diffusion zone structure in binary eutectic. 5th International Workshop on Directionally Solidified eutectic Ceramics, April 3 - 7 2016 Warsaw, Poland.
41. Borodich F.M., Galanov B.A. et al. Evaluation of Adhesive and Elastic Properties of Materials by Non-Spherical Indenters. International Workshop: Multi-Scale and Multi-Physics Testing of High-Performance Materials Technische Universitat Berlin, Germany, February 18-19, 2016.
42. Zakarian D. AB initio strength calculation of MoS2 dichalcogenide nanoparticles intercalated with hydrogen/ D. Zakarian, V. Kartuzov, A. Khachatrian //4th International research and practice conference nanotechnology and nanomaterialas NANO-2016, August 24 - 27, 2016, Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, Ukraine.
43. D. Zakarian, A. Khachatrian .Ab Initio calculations of the elastic modulus of composites LaB6 - MeB2 (Me - Ti, Zr, Hf) from the temperature dependences//DSEC-2016 Directionally solidified 5, Eutectic ceramics, 2016; - abstracts. -Warsaw Poland– 2016.-P. 24.
44. Barvitskiy P.P., Prikhna Т.А., Muratov V.B., Kartuzov V.V., Sverdun V.B., Dub S.N., Loshak М.G., Moshchil V.Е., Karpets М.V., Basyuk T.V., Kozyrev A.V., Kovylaev V.V. Structure and properties of composite materials based on higher aluminium borides // Abstracts of E-MRS 2016 Fall Meeting of the European Materials Research Society. – 2016. – 19-22 September. – Poland, Warsaw. – Р. X.5.4
45. Barvitskyi P.P., Prikhna Т.А., Muratov V.B., Kartuzov V.V., Sverdun V.B., Dub S.N., Loshak М.G., Moshchil V.Е., Karpets М.V., Basyuk T.V., Kozyrev A.V., Kovylaev V.V. The parameters of production of composite materials based on higher aluminium borides // Abstracts of E-MRS 2016 Fall Meeting of the European Materials Research Society. – 2016. – 19-22 September. – Poland, Warsaw. – Р. ZU.2.3.
46. B. A. Galanov, V. V. Kartuzov, S. M. Ivanov and A. A. Pryadko. Evaluation of temperature jump at the front of comminution and compaction of the ceramic target material at high velocity impact. 41st Int'l Conf & Expo on Advanced Ceramics & Composites (ICACC 2017). 10 p.
47. Zakarian D. The coefficient of thermal expansion of LaB6 – MeB2 composites / D. Zakarian, A. Khachatrian// European Advanced Materials Congress-2017.- 22-24th August, Stockhol-Helsinki, Sweden - DOI:10. 5185/eamc-2017.
48. Zakarian D. Ab Initio calculations of the elastic modulus of composites LaB6 - MeB2 (Me - Ti, Zr, Hf) from the temperature dependences / D. Zakarian, A. Khachatrian// European Advanced Materials Congress-2017.- 22-24th August, STockhol-Helsinki, Sweden -DOI:10. 5185/eamc-2017.
49. Zakarian D. Influence of interfacial interactions and quasi-coherent boundaries on the structure formation of eutectic systems// European Advanced Materials Congress-2017.- 22-24th August, STockhol-Helsinki, Sweden - DOI:10. 5185/eamc-2017.
50. Zakarian D. Features Composite B4C – SiC with the eutectic composition/ D. Zakarian, A. Khachatrian//Inter. Conf. on Composite Materials-ICCM21.-20-25 thAugust –Xi’an, China.-2017.
51. Zakarian D. Ultimate strength of crystals, nanoparticles and nano-ceramics having diamond-like structure/ D. Zakarian, V. Kartuzov, A. Khachatrian// 12th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology.- May 21 -26, 2017, Hawaii, USA.
52. Galanov B.A., Milman Yu.V., Chugunova S.I., Goncharova I.V., Voskoboinik I.V. Application of Improved Inclusion Core Model of the Indentation Process for the Determination of Mechanical Properties of Materials //Crystals 2017, 7 , 87; doi: 10. 3390/crist7030087.
53. Галанов Б.А., Валеева И.К. Скользящий адгезионный контакт шероховатых упругих тел. труды конф. в Тбилиси.2017.
54. I.V. Kartuzov, V. L. Bekenev and V. V. Kartuzov. Molecular-dynamic modeling of propagation of shock wave in porous ceramic materials. 41st Int'l Conf & Expo on Advanced Ceramics & Composites (ICACC 2017).
55. V. Kartuzov, P. Mazur, O. Vasiliev, V. Muratov, Y. Kartuzov, A new AlB12 based composite with aluminium matrix // 12-th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology (PACRIM’12) – May 21–26, 2017 – Waikoloa, Hawaii.
56. O. Vasiliev, V. Kartuzov, V. Muratov, P. Mazur, V. Garbuz, Y. Kartuzov, New Ceramic Material AlB12-AlN: A Combination of High Boron Content, Hardness and Thermal Conductivity // 12-th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology (PACRIM’12) – May 21–26, 2017 – Waikoloa, Hawaii.
57. О. О. Васільєв, П. В. Мазур, В. Б. Муратов, Т. О. Прихна, П. П. Барвіцький, В. В. Гарбуз, В. В. Картузов, Композиційна кераміка на основі додекабориду та нітриду алюмінію // VI Міжнародна науково-практична «Теоретичні та експериментальні дослідження у технологіях сучасного матеріалознавства і машинобудування» – 30 травня- 3 червня, 2017. – Луцьк, Україна.
58. Patent of Ukraine IC:С04 В 35/58:35/593 Prikhna Т.А., Barvitskiy P.P., Kozyrev A.V., Moshchil V.Е., Sverdun V.B., Karpets М.V., Kartuzov E.V., Kartuzov V.V., Muratov V.B., Garbus V.V. «Method of preparation of dicarbo-dodecaboride-based material».
59. Patent of Ukraine IC:С04 В 41/80 (Utility model) Prikhna Т.А., Barvitskiy P.P., Kozyrev A.V., Moshchil V.Е., Sverdun V.B., Karpets М.V., Kartuzov E.V., Kartuzov V.V., Muratov V.B., Garbus V.V. «Method of preparation of dicarbo-dodecaboride-based material».