RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES
LAVRENTYEV INSTITUTE OF GYDRODINAMICS
INSTITUTE OF STRENGTH PHYSICS AND MATERIAL SCIENCE
DEPARTMENT OF STRUCTURAL MACROKINETICS OF TOMSK SCIENTIFIC CENTER
INSTITUTE OF SOLID STATE CHEMISTRY AND MECHANOCHEMISTRY
NIKOLAEV INSTITUTE OF INORGANIC CHEMISTRY
INSTITUTE FOR PROBLEMS OF CHEMICAL AND ENERGETIC TECHNOLOGIES
INSTITUTE OF COMPUTATIONAL MATHEMATICS
AND MATHEMATICAL GEOPHYSICS
THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE
OF THE RUSSIAN FEDERATION
TOMSK STATE UNIVERSITY

DINAMICS OF STRUCTURAL AND PHASE STATES AND FUNDAMENTAL PRINCIPLES OF SHAPED-CHARGE SYNTHESIS OF NANOCOMPOSITES

Editors-in-chief
dr. of Sci. *V.K. Kedrinskiy*
cor. mem. of RAS *S.G. Psahye*

NOVOSIBIRSK
PUBLISHING HOUSE OF THE SIBERIAN BRANCH
OF THE RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES
2012

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ГИДРОДИНАМИКИ им. М.А. ЛАВРЕНТЬЕВА
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ПРОЧНОСТИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ
ОТДЕЛ СТРУКТУРНОЙ МАКРОКИНЕТИКИ ТОМСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МЕХАНОХИМИИ
ИНСТИТУТ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ им. А.В. НИКОЛАЕВА
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ГЕОФИЗИКИ
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ДИНАМИКА СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЙ И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ КУМУЛЯТИВНОГО СИНТЕЗА НАНОКОМПОЗИТОВ

Ответственные редакторы
доктор физ.-мат. наук *В.К. Кедринский*
чл.-кор. РАН *С.Г. Псахье*

НОВОСИБИРСК
ИЗДАТЕЛЬСТВО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
2012

УДК 538.9+620.22
ББК 22.37+30.3
Д54

Редакционная коллегия серии:

академик В.М. Фомин (главный редактор),
академик Ю.И. Шокин, член-корреспондент РАН В.А. Ламин,
член-корреспондент РАН В.Н. Опарин, доктор биологических наук В.В. Глупов,
доктор экономических наук В.Ю. Малов, доктор химических наук В.П. Федин,
кандидат физико-математических наук Н.Г. Никулин (ответственный секретарь)

Серия основана в 2003 г.

Д54 **Динамика структурно-фазовых состояний и фундаментальные основы кумулятивного синтеза нанокомпозитов** / отв. ред. В.К. Кедринский, С.Г. Псахье; Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т гидродинамики [и др.]. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2012. – 244 с. (Интеграционные проекты СО РАН; вып. 42).

Синтез новых соединений и структурно-фазовых состояний – одно из актуальных направлений фундаментальных проблем физики твердого тела и современного материаловедения, решение которых зависит от возможности создания экстремальных условий по давлениям и температурам. Новое технологическое направление – кумулятивный синтез – позволяет использовать широкий спектр химических элементов и их композиций, включая совмещение тяжелых и легких элементов, что было невозможно в рамках известных динамических методов. Разработка математической модели дает возможность впервые оценить динамические параметры, необходимые для кумулятивного синтеза соответствующих фазовых состояний.

Монография предназначена для научных работников, инженеров и аспирантов, интересующихся проблемами кумулятивного синтеза нанокомпозитов.

Утверждено к печати
Ученым советом Института гидродинамики СО РАН им. М.А. Лаврентьева

Рецензенты

доктора физико-математических наук *Э.Р. Шрагер, П.В. Макаров, В.Ф. Косарев*

Работа выполнена в рамках
междисциплинарных интеграционных проектов СО РАН № 29 «Разработка научных основ кумулятивного синтеза новых наноструктурных соединений и покрытий методом встречных пучков и мишеней», № 32 «Динамика структурно-фазовых состояний и фундаментальные основы синтеза нанокомпозитов в кумулятивных потоках»

ISBN 978–5–7692–1259–8
ISBN 978–5–7692–0669–6

© Коллектив авторов, 2012
© Институт гидродинамики СО РАН, 2012
© Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 2012
© Отдел структурной макрокинетики ТНЦ СО РАН, 2012
© Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, 2012
© Институт неорганической химии СО РАН, 2012
© Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, 2012
© Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 2012
© Томский государственный университет, 2012
© Оформление. Издательство СО РАН, 2012

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ 5

Глава 1. **ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И СИНТЕЗА В КУМУЛЯТИВНЫХ ТЕЧЕНИЯХ** 8

1.1. Синтез соединений и физико-химические превращения при схлопывании порошковой кумулятивной облицовки 11
1.2. Синтез покрытий при соударении кумулятивного потока с преградой 16
1.3. Реактор на встречных кумулятивных потоках 20
1.4. Гетерогенные композиционные ВВ в кумулятивном синтезе 21
Литература 25

Глава 2. **ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ УДАРНО-ВОЛНОВОГО НАГРУЖЕНИЯ ПОРОШКОВЫХ СМЕСЕЙ** 28

2.1. Ударная адиабата порошковых смесей . . . . . –
2.2. Расчет с переменным коэффициентом Грюнайзена 31
2.3. Ударные адиабаты с учетом фазового перехода 33
2.4. Оценка давления и температуры в зоне кумулятивного реактора . . 38
Литература 44

Глава 3. **ВЫСОКОСКОРОСТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЧАСТИЦ И МЕХАНОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ МАЛОРАЗМЕРНЫХ ПОРОШКОВ (МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ)** 47

3.1. Физико-механические превращения при столкновении частиц . . . –
3.1.1. Метод молекулярной динамики . . . . . –
3.1.2. Метод подвижных клеточных автоматов 53
3.1.3. Особенности разрушения керамических частиц при ударе . . . 61
3.1.4. Структурные превращения при соударении наночастиц меди 65
3.1.5. Соударения наночастиц никеля. Влияние насыщения наночастиц водородом 69
3.2. Кумулятивный синтез (клеточно-автоматные модели) 72
Введение . . . . . –
3.2.1. Образование кумулятивной струи на этапе схлопывания порошковой облицовки 73
3.2.2. Взаимодействие мишени с кумулятивным потоком частиц, синтез покрытия 82
3.2.3. Клеточно-автоматная модель потока частиц порошков в газе 89
3.3. Макрокинетика механохимического синтеза порошков-прекурсоров 100
Введение . . . . . –
3.3.1. Математическая модель 101

3.3.2. Исследование модели 108
3.3.3. Определение эффективных кинетических констант 113
Литература 121

Глава 4. **МЕХАНОКОМПОЗИТЫ В КАЧЕСТВЕ ПРЕКУРСОРОВ ПРИ КУМУЛЯТИВНОМ СИНТЕЗЕ ПОКРЫТИЙ** 126

4.1. Особенности и режимы получения механокомпозитов . . . . . –
4.2. Электронно-микроскопическое и рентгенографическое исследование дефектной микроструктуры механокомпозитов 132
4.2.1. Методика электронно-микроскопического исследования субструктур с высокой континуальной плотностью дефектов . . . 134
4.2.2. Результаты рентгеноструктурного анализа 137
4.2.3. Электронно-микроскопическое исследование дефектной субструктуры 139
4.2.4. Поля локальных внутренних напряжений 149
4.3. Высокодефектные наноструктурные состояния с высокими локальными градиентами напряжений 150
4.4. Результаты экспериментального исследования кумулятивного синтеза с предварительной механоактивацией порошковых смесей 155
4.5. Механическая активация и ее влияние на структурное состояние и фазовый состав нанокристаллических порошков ZrO_2–Y_2O_3 и ZrO_2–Y_2O_3–Al_2O_3 172
Литература 180

Глава 5. **РАЗЛОЖЕНИЕ И СИНТЕЗ СОЕДИНЕНИЙ В КУМУЛЯТИВНОМ РЕАКТОРЕ** 187

5.1. Кумулятивный синтез высокотемпературных фаз W_2B и β-WB . . . . –
5.2. Разложение прекурсоров в кумулятивных течениях с последующим синтезом новых соединений 193
5.3. Синтез высокотвердых покрытий на стальных и титановых подложках 198
Литература 201

Глава 6. **КУМУЛЯТИВНЫЕ ОБЛИЦОВКИ ИЗ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ** 203

6.1. Превращения в диоксиде циркония в кумулятивном реакторе . . . . –
6.2. Фазовые превращения и кинетика уплотнения нанопорошков на основе ZrO_2 при высокотемпературных воздействиях и механическом уплотнении 210
6.3. Динамическая обработка нанопорошков высокими давлениями . . 220
Литература 232

ЗАКЛЮЧЕНИЕ 235

CONTENTS

PREFACE 5

Chapter 1. **PHYSICAL PRINCIPLES OF PHYSICOCHEMICAL TRANSFORMATIONS AND SYNTHESIS IN SHAPED-CHARGE FLOWS** 8

1.1. Synthesis of compounds and physicochemical transformations under collapse of powder liner 11

1.2. Synthesis of coatings under the collision of shaped-charge flow and barrier 16

1.3. Reactor involving oppositely directed shaped-charge flows 20

1.4. Heterogeneous composition explosives in shaped-charge synthesis . . . 21

References to Chapter 1 25

Chapter 2. **CONSTRUCTION OF THE MODEL OF SHOCK-WAVE LOADING OF POWDER MIXTURES** 28

2.1. Shock adiabat of powder mixtures . . . . . –

2.2. The Gruneisen variable coefficient calculation 31

2.3. Shock adiabats with allowance for phase transition 33

2.4. Pressure and temperature estimate in «shaped-charge reactor» zone . . 38

References to Chapter 2 44

Chapter 3. **HIGH-VELOCITY INTERACTION OF PARTICLES AND MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF SMALL-SIZED POWDERS (MATHEMATICAL MODELS AND NUMERICAL ANALYSIS)** 47

3.1. Physical and mechanical transformations under collision of particles –

3.1.1.Method of molecular dynamics . . . . . –

3.1.2. Method of moving cellular automations 53

3.1.3. Peculiarities of disintegration of ceramic particles under impact 61

3.1.4. Structural transformations under collision of copper nanoparticles 65

3.1.5. Collisions of nickel nanoparticles. Influence of hydrogen saturation of nanoparticles 69

3.2. Shaped-charge synthesis (cellular-automation models) 72

Introduction . . . . . –

3.2.1. Formation of shaped-charge jet at the stage of collapse of powder liner 73

3.2.2. Interaction of target and shaped-charge flow of particles, synthesis of coating 82

3.2.3. Cellular-automation model of the flow of powder particles in gas 89

3.3. Macrokinetics of mechanochemical synthesis of precursor powders . 100

Introduction . . . . . –

3.3.1. Mathematical model 101

3.3.2. Investigation of the model 108
3.3.3. Determination of effective kinetic constants 113
References to Chapter 3 121

Chapter 4. **MECHANOCOPOSITES AS PRECURSORS UNDER SHAPED-CHARGE SYNTHESIS OF COATINGS** 126

4.1. Peculiarities and regimes of obtaining of mechanocomposites . . . . . –
4.2. Electron microscopy and X-ray examination of defect microstructure of mechanocomposites 132
4.2.1. Technique of electron microscopy examination of substructures with high continuum density of defects 134
4.2.2. The results of X-ray structural analysis 137
4.2.3. Electron microscopy examination of defect substructure 139
4.2.4. Fields of local internal damage 149
4.3. Highly defective nanostructural states with high local voltage gradients 150
4.4. Shaped-charge synthesis with mechano-activated powder mixtures (ex-1perimental invesigation) 155
4.5. Influence of mechano-activation on the structural state and phase composition of nanocrystal powders $ZrO{-}Y_2O$ and $ZrO_2{-}Y_2O_3{-}Al_2O_3$ 172
References to Chapter 4 180

Chapter 5. **DECOMPOSITION AND SYNTHESIS OF COMPOUNDS IN SHAPED-CHARGE REACTOR** 187

5.1. Shaped-charge synthesis of high-temperature phases W_2B and в-WB –
5.2. Decomposition of precursors in shaped-charge flows with subsequent synthesis of new compounds 193
5.3. Synthesis of high-hard coatings on steel and titanium substrates 198
References to Chapter 5 201

Chapter 6. **SHAPED-CHARGE LINERS MADE OF NANOCRYSTAL ZIRCONIUM-DIOXIDE-BASED POWDERS** 203

6.1. Transformations in zirconium dioxide in shaped-charge reactor . . . . –
6.2. Phase transformation and kinetics of compaction of ZrO_2-based nano-powders under high-temperature actions and mechanical compaction 210
6.3. Dynamic high-pressure forming of nanopowders 220
References to Chapter 6 232

CONCLUSION 235