

2. A. Grunenwald, C. Keyser, A.M.Sautereau, E.Crubézy, B.Ludes, C.Drouet, Revisiting carbonate quantification in apatite (bio)minerals: a validated FTIR methodology, *J. of Archaeological Science*. 49, 134-141 (2014).
3. W. J. Pestle, F. Ahmad, B. J. Vesper, G. A. Cordell, M. D.Colvard, Ancient bone collagen assessment by hand-held vibrational spectroscopy, *J. of Archaeological Science*. 42, 381-389 (2014).
4. S. Weiner, O. Bar-Yosef, States of preservation of bones from prehistoric sites in the Near East: a survey, *J. Archaeol. Sci.* 17, 187–196 (1990).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ФАЗОВОГО ПОЛЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ В УСЛОВИЯХ ОБЪЕМНОГО СИНТЕЗА

Лоос Е.М.¹, Анимимова М.А.²

¹) Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия

²) ИФПМ СО РАН, г. Томск, Россия

E-mail: loos.katya@yandex.ru

USING THE PHASE FIELD METHOD FOR MODELING OF THE MATERIALS STRUCTURE UNDER VOLUMETRIC SYNTHESIS CONDITIONS

Loos E.M.¹, Anisimova M.A.²

¹) National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia

²) ISPMS SB RAS, Tomsk, Russia

In this work, an attempt has been made to build a two-level model of volumetric synthesis using the phase field at the micro level. The main task of this work is to study the kinetic regularities of phase growth depending on the way of setting structure and on the size of the structural element.

Синтез новых материалов из порошков металлов или металлов и неметаллов может быть осуществлен в разных режимах. Среди них тепловой взрыв, горение, управляемый послойный или объемный синтез. В классических работах синтез в условиях линейного или нелинейного нагрева называют динамическим тепловым взрывом. Однако именно тепловой взрыв реализуется не всегда. Объемный синтез новых материалов сопровождается не только изменением состава, но и формированием структуры. Попытки

описания формирования структуры в процессе синтеза в литературе связаны с выделением так называемых реакционных ячеек, условная структура которых связывается с размером тугоплавких частиц и долей легкоплавкого компонента.

К настоящему времени известны более или менее обоснованные модели для простейших бинарных систем, типа Ti-C; Ta-C; Zr-Al, Hf-B, Ni-Al; Ti-Al. В общем случае выделение реакционных ячеек неоднозначно, зависит от условий синтеза и динамики изменения температуры.

В настоящей работе предпринята попытка построить двухуровневую модель объемного синтеза с использованием для описания фазовых и структурных превращений на микроуровне (в реакционной ячейке) метода фазового поля. Этот метод сам по себе в настоящее время активно применяется в разных областях науки о материалах для описания процессов структурообразования, спекания, разрушения и т.п. Метод

обосновывается в термодинамике необратимых процессов и имеет много общего с теорией Ландау фазовых переходов второго рода и базируется на введении дополнительных термодинамических параметров и параметра порядка (скалярной, векторной или тензорной природы). В основе метода фазового поля лежит использование специальных структурных параметров.

В простейших вариантах метод фазового поля позволяет изучить эволюцию микроструктуры вследствие разделения фаз, исходя из некоторого начального состояния. Направление модификации структуры определяется

вторым законом термодинамики. Начальная структура может быть задана случайным образом или иметь конкретный вид, полученный из экспериментальных данных. Изменяя способы задания начальной структуры, устанавливается зависимость кинетики роста фаз

от начальных условий. Основная задача данной работы – изучить кинетические закономерности роста фаз в зависимости от способа задания случайной структуры, а также от размера выделенного структурного элемента. Это поможет осуществить выбор варианта реакционной ячейки для описания объемного синтеза композита.

Авторы благодарят д.ф.-м.н. Князеву Анну Георгиевну (научного руководителя) за постановку проблемы и обсуждение результатов.

1. Некрасов Е.А., Смоляков В.К., Максимов Ю.М. Математическая модель горения системы титан-углерод // ФГВ, 1981, Т.81, № 5, С.39-46
2. Лапшин О.В., Овчаренко В.Е. Математическая модель высокотемпературного синтеза алюминида никеля Ni₃Al в режиме теплового взрыва порошковой смеси чистых элементов, Физика горения и взрыва, 3 (1996), 32 68-76
3. Евстигнеев, В. В. В. Ю. Филимонов, К. Б. Кошелев Математическая модель процессов фазообразования в бинарной порошковой смеси Ti - Al в режиме неадиабатического теплового взрыва, Физика горения и взрыва, 2 (2007) 52-57.
4. S. Bulent Biner, Programming Phase-Field Modeling, Idaho National Laboratory Idaho Falls, ID, USA (2017)
5. Charach, C., Fife, P.C. On Thermodynamically Consistent Schemes for Phase Field Equations. Open Systems & Information Dynamics 5, 99–123 (1998).