

**Atomistic-scale description of SHS in reactive multilayer nanofoils:
from wave propagation to microstructure**

F. Baras and O. Politano
ICB, CNRS-University of Bourgogne Franche-Comté, France

We studied the self-sustaining propagating alloying reaction occurring in reactive multilayer nanofoils, such as NiAl, by means of molecular dynamics simulations and numerical modeling. This combined approach allows to explore the elemental mechanisms underlying the SHS process at nanoscale. During this talk, we review the main results obtained during the last years including the characterisation of the front propagation as a function of parameter values, the determination of phase transformations involved in the alloying wave, and the relation between microstructure and combustion wave. Focus will be on nucleation and growth mechanisms.

**Исследование в масштабе атомов процессов СВС в реакционных многослойных
нанопленках: от распространения волны до микроструктур**

Ф. Барас (докладчик) и О. Политано
ICB, CNRS-University of Bourgogne Franche-Comté, France

Будут представлены результаты исследования самораспространяющихся реакций сплавообразования в реакционных многослойных нанофольгах, таких как NiAl, с помощью молекулярно-динамического моделирования и численного моделирования. Этот комплексный подход позволяет изучить механизмы СВС в наномасштабе. В лекции дан обзор основных результатов, полученных за последние годы, включая характеристику закономерностей распространения фронта как функцию параметров системы, определение фазовых превращений в волне сплавообразования, и взаимосвязь между микроструктурой и волной горения. Основное внимание уделено механизмам зарождения и роста продуктов.

Simulations of reactive processes performed at the laboratory ICB : an overview

O. Politano and F. Baras
ICB, CNRS-University of Bourgogne Franche-Comté, France

The development of parallel computing architectures allows us to perform atomic-level simulations to study the structure and thermo-mechanical properties of nanomaterials. One of the most useful atomistic-level approaches is the molecular dynamics (MD) method, which can follow the time evolution of a set of atoms in nanometric systems over tens of nanoseconds. In our research group, MD is used as an « numerical experiment » to provide insight and understanding of how complex systems behave beyond what theory and laboratory experiment could deliver separately. During this talk, we will present our approach developed in recent years to study of reactive processes (oxidation, multi-layers, ...) by MD. We will also give some recent developments in order to simulate new processes such as joining and milling.

Моделирование реакционных процессов в Междисциплинарной лаборатории им. Карно Бургундского (laboratory ICB): краткий обзор

О. Политано (докладчик) и Ф. Барас
ICB, CNRS-University of Bourgogne Franche-Comté, France

Развитие архитектуры параллельных вычислений позволяет нам производить имитационное моделирование на атомном уровне с целью изучения структуры и термо-механических свойств наноматериалов. Один из наиболее полезных атомистических подходов – метод молекулярной динамики (МД), который позволяет проследить эволюцию всех атомов нано-масштабных систем за время порядка десятков наносекунд. В нашей исследовательской группе метод МД используется для «численного эксперимента», который дает возможность понять поведение сложных систем в масштабах и в условиях, недоступных пока теории и лабораторным экспериментам. В данной презентации представлены недавно разработанные подходы к изучению реакционных процессов (окисление, многослойные структуры...) методом МД. Рассмотрены также новые достижения в имитационном моделировании процессов соединения материалов и размола.