

УДК: 51-72; 51-74; 621.039

Атомная визуализация алмазного резания

В. Ю. Попов^а, А. Н. Хлыстов, А. В. Бондин

Братский государственный университет,
Россия, 665709, Иркутская область, г. Братск, ул. Макаренко, д. 40
E-mail: ^аberkutoff@rambler.ru

*Получено 8 февраля 2016 г.,
после доработки 24 февраля 2016 г.*

Данная работа посвящена созданию статической атомной модели двух поверхностей, контактирующих при электроалмазной обработке: алмазных зерен и шлифуемого ими материала. В центре работы стоят вопросы компьютерной визуализации этих поверхностей на молекулярном уровне, поскольку традиционное математическое описание не обладает достаточной наглядностью для демонстрации некоторых аспектов атомистической трибологии резания металлов с одновременно протекающими разными по своей физической природе процессами. А в электроалмазной обработке сочетается воздействие одновременно нескольких процессов: механический, электрический и электрохимический. Поэтому предлагаемая авторами методика моделирования остается единственным способом увидеть, что именно происходит на атомном уровне при резании материала алмазным зерном. В то же время статья может быть полезна как научно-познавательная, так как позволяет читателю понять, как на атомном уровне выглядят поверхности некоторых материалов.

Ключевые слова: моделирование и компьютерная визуализация, металлические фазы, тип кристаллической решетки, атомный радиус, комбинированная электроалмазная обработка, алмазное зерно

Atomic visualization diamond cutting

V. Yu. Popov, A. N. Khlystov, A. V. Bondin

Bratsk State University, 40 Makarenko st., Bratsk., 665709, Russia

Abstract. — This work is devoted to creation of static atomic model of two surfaces in contact at electric diamond grinding: single-points diamond and material grinded of them. At the heart of the work there are issues of computer visualization of these surfaces at the molecular level, since traditional mathematical description does not possess sufficient visualization to demonstrate some aspects of the atomic tribology of metal cutting to simultaneously occurring the different, by their physical nature, processes. And in the electric diamond grinding blends effect of several processes simultaneously: mechanical, electrical and electrochemical. So the modeling technique proposed by authors is still the only way to see what is happening at the atomic level, cutting material of single-point diamond.

Keywords: modeling and computer simulation, metal phases, unit cell, atomic radius, combined electric diamond grinding, diamond grain

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ, код проекта: 927.

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2016, vol. 8, no. 1, pp. 137–149 (Russian).

Введение

Информационно-коммуникационные технологии, применяемые в машиностроении, нуждаются в скорейшей разработке эффективных форм представления информации, контента и знаний, поскольку формирование на их основе цифровых, компьютерных моделей физических и технологических процессов позволит более эффективно управлять жизненным циклом предоставляемых товаров и услуг. Согласно Концепции долгосрочного социально экономического развития Российской Федерации [Прогноз..., 2005; Прогноз..., 2008] основным направлением, реализующим технологический прогресс машиностроительного комплекса, является развитие существующих и разработка новых технологий, включая электрохимические и электрофизические методы обработки материалов с повышенными характеристиками и соединение их с информационными технологиями для получения *интеллектуального машиностроения*, оснащенного средствами контроля и управления. Наиболее перспективным инструментом для синтеза информационных технологий и машиностроения является компьютерное моделирование.

Еще с середины XX века, с совершенствованием ЭВМ, с увеличением их быстродействия, для визуализации процессов, происходящих на молекулярном уровне, в исследованиях стали применять компьютерные методы молекулярной динамики (МД). Появился термин *атомистическое моделирование*, и исторически сложилось так, что на данный момент распространены и сосуществуют два термина — «*атомистическое моделирование*» и «*молекулярное моделирование*» [Kholmurodov et al., 2001; Холмуродов и др., 2003; Норман, Стегайлов, 2012].

В настоящее время в России существует не так много работ, посвященных визуализации физических процессов методами МД [Терентьев и др., 2005; Колесников и др., 2012; Нагорнов, 2012; Батгэрэл, Никонов, Пузынин, 2013; Куксин и др., 2014; Новоселов, Куксин, Янилкин, 2014]. Однако, за редким исключением [Грабченко, Федорович, 2008], практически нет работ в области машиностроения, связанных с атомным моделированием структуры материалов либо после, либо во время процесса резания. В первую очередь это связано с ограниченными вычислительными мощностями тех персональных компьютеров (ПК), которые доступны большинству исследователей. Для решения актуальных задач, например, в области материаловедения при разработке новых конструкционных и функциональных наноматериалов, для предсказательного моделирования их свойств, необходимо производить молекулярное моделирование на высоких мощностях современных суперкомпьютеров. Поэтому вопросы о возможности атомистического моделирования статической структуры материалов, моделирования процесса их резания, т. е. визуализация поверхностей на атомном уровне, нашедшая отражение в компьютерной 3D-графике и видео, еще долгое время будут весьма актуальны.

Параметры моделирования

В большинстве случаев, чтобы визуализировать металлическую систему, необходимо руководствоваться следующими этапами:

- выбрать программу, в которой будет осуществляться моделирование статической структуры;
- задать начальную конфигурацию (определить положение атомов, выбрать среду окружения и иные термодинамические параметры и т. п.);
- выбрать межатомные силы взаимодействия и/или произвести их расчет (исходными данными являются модели состояний свойств системы);
- сгенерировать МД-траектории в соответствии с теми термодинамическими условиями, в которых изучается система (исходными данными являются модели пространственно-временных отношений);
- произвести анализ результатов, обработать массивы данных, графику и т. п. [Kholmurodov et al., 2001; Холмуродов и др., 2003] (исходными данными являются модели функционирования и имитационные модели).

Выбор программы для визуализации

Существует не так много пакетов научных и прикладных программ общего пользования, которые подходят для задачи визуализирования металлической системы. Самые известные из них — это *AMBER*, *GROMOS*, *DL_POLY*, *X-PLOR* и некоторые другие. Однако практически все из них предназначены для МД-моделирования *биологических структур*, для визуализации трехмерной структуры простых и сложных молекул либо геномов и не подходят для машиностроительных целей. Работа с ними в подавляющем большинстве случаев затруднена вычислениями, связанными с электрическими взаимодействиями в моделируемой системе, что, в свою очередь, требует использования мощных процессоров. Поэтому нами был сформулирован ряд специфических требований для выбора программы, которая позволила бы исключить подобные расчеты, но без искажения реальной динамики системы и с обязательным наличием удовлетворительной физики. Поэтому пакет должен быть не только профессиональным но и

- включать в себя средства для создания трехмерной компьютерной графики, моделирования, анимации с использованием современных методов рендеринга и постобработки видео;

- иметь широко настраиваемые параметры, возможность работы с библиотеками материалов с использованием гибких инструментальных средств для адаптации к изменяющимся условиям моделирования;

- иметь возможность стабильной работы (в части моделирования и манипулирования) со сценами, содержащими более 1 миллиона частиц, при отсутствии у ПК высокой вычислительной мощности;

- иметь функцию *запекания*¹ анимации при дальнейшем рендере видео. От количества кадров зависит плавность изображения: чем меньше кадров, тем резче движение и тем грубее будет показано взаимодействие алмазного зерна с материалом, в связи с чем необходимо подбирать приемлемое количество кадров.

Данным требованиям отвечает свободный проект с открытым исходным кодом — *Blender*, программный продукт для 3D-анимации, моделирования, рендеринга и композитинга. Однако, как показала практика, наиболее важным при визуализации является не столько программа, сколько техническое знание и понимание физических процессов, протекающих при резании, грамотность выбора начальной конфигурации системы.

Задание начальной конфигурации системы

При шлифовании имеет место контакт двух *ювенильных поверхностей*, то есть поверхностей, которые в результате механического трения лишаются оксидной, «защитной» пленки и считаются чистыми, свежееобнаженными [Братков, 1985]. Наиболее просто с точки зрения математического аппарата — реализовать моделирование ювенильных поверхностей по атомам, то есть профиль обрабатываемой поверхности и алмазного зерна задается в виде набора атомов в соответствующей кристаллической решетке. Обрабатываемая поверхность представляется как плоскость, состоящая из элементарных блоков (*кластеров*) кристаллических решеток. Было определено, что исходными данными для выполнения первых двух этапов визуализации поверхностей должны являться следующие:

- изображения поверхностей быстрорежущей стали (БРС) (рис. 1, а) и алмазного шлифовального круга (АШК) на металлической связке (рис. 1, б) [Попов, Янюшкин, 2013; Попов, Янюшкин, Андронов, 2014; Попов, Янюшкин, 2014], полученные² с помощью растровой электронной микроскопии (SEM);

¹ К «запеканию» (от англ. *bake*) относят расчет процессором ПК анимации движения частиц, объектов, физики и т. п. Итогом является моделируемая сцена, но уже в динамике, с наличием треклайна (полоски проматывания анимации), которую можно промотать, при необходимости внести изменения и только после этого применить к сцене рендеринг изображений.

² Scanning Electron Microscope Photograph, Carl Zeiss EVO®50 XVP.

- параметры микрорельефа [Попов, Янюшкин, Сурьев, 2003; Янюшкин, Медведева, Янюшкин, Попов, 2012], полученные³ средствами оптической интерферометрии (рис. 1, б, д);
- фазовый состав обрабатываемого материала [Попов, Янюшкин, Медведева, Скиба, 2014; Медведева, Янюшкин, Попов, 2014], полученный⁴ рентгеноструктурным анализом (рис. 1, в);
- химический состав поверхностей [Попов, Большаков, Гуглин, Распутин, 2010; Янюшкин, Медведева, Янюшкин, Попов, 2012; Попов, Янюшкин, 2013; Янюшкин и др., 2013], полученный⁵ рентгеновским энергодисперсионным анализом (рис. 1, е);
- радиусы атомов, а значит и размер блоков, задаются согласно справочным данным [Физические величины, 1991; Епифанов, 2011];
- исследования, проведенные рядом авторов при помощи, например, сканирующей туннельной спектроскопии [Ельцов и др., 2003], атомно-зондовой масс-спектрометрии [Голстогузов, 2009] и методами электронного и ионного проекторов [Баландин, Рубинштейн, 1967; Томас Дж., Томас У., 1969; Андерсон, 1972; Лодиз, Паркер, 1974], также позволяют судить о начальной конфигурации, давая возможность изучать топографическое изображение поверхности с разрешением вплоть до атомного.

Особо следует отметить основные сложности, с которыми приходится сталкиваться при выборе начальной конфигурации:

- огромное разнообразие возможных конфигураций моделируемой системы; например, размеры фаз или карбидных зерен в микроструктуре БРС [Козлов и др., 2004; Хараев и др., 2005], как и расположение, например, направлений плоскостей спайности в алмазных зернах просто не поддается исчислению;
- уже вышеупомянутое отсутствие мощностей для эффективного расчета электрических сил и полей с учетом парного взаимодействия отдельных атомов;
- до сих пор остаются не вполне ясными механизмы генерации траекторий атомов в различных термодинамических условиях (при разных режимах резания), на что указывает отсутствие согласия между теорией и экспериментом, а также противоречивые экспериментальные данные [Холмуродов и др., 2003];
- трудно представить, каким должно быть силовое поле визуализируемого на атомном уровне процесса резания, поэтому на данном этапе моделирования его обсуждение не затрагивается.

Как видно, часть технологических задач относится к творческим задачам, то есть тем, которые слабо поддаются формализации, поэтому алгоритмы их решения, подчеркнем, являются приближенными и субъективными. Последовательное решение этих задач, нахождение методов их решения, определение закономерностей, уточнение имеющихся математических моделей, а главное, доступность применения программных пакетов для моделирования статических структур позволят значительно расширить область применения компьютерных технологий в машиностроении, например, для предварительного анализа проектируемых изделий, материалов и технологий.

Масштаб статической структуры

Для визуализации поверхностей, в отличие от их молекулярного моделирования, достаточно подобрать масштаб таким образом, чтобы визуальная картина отличалась наибольшей наглядностью тех изменений, которые происходят в атомной структуре во время резания. Под *изменением* будем понимать любые искажения кристаллической решетки моделируемой статической структуры.

Поскольку размер атомов, из которых моделируется структура, в среднем составляет $\approx 0,12$ нм, то грань алмазного зерна длиной в 1 мкм может состоять из ≈ 12000 атомов (рис. 2, а).

³ Zygo NewView™7300.

⁴ ARL X'TRA (Thermo Fisher Scientific).

⁵ Energy-Dispersive X-ray Analysis (Oxford Instruments).

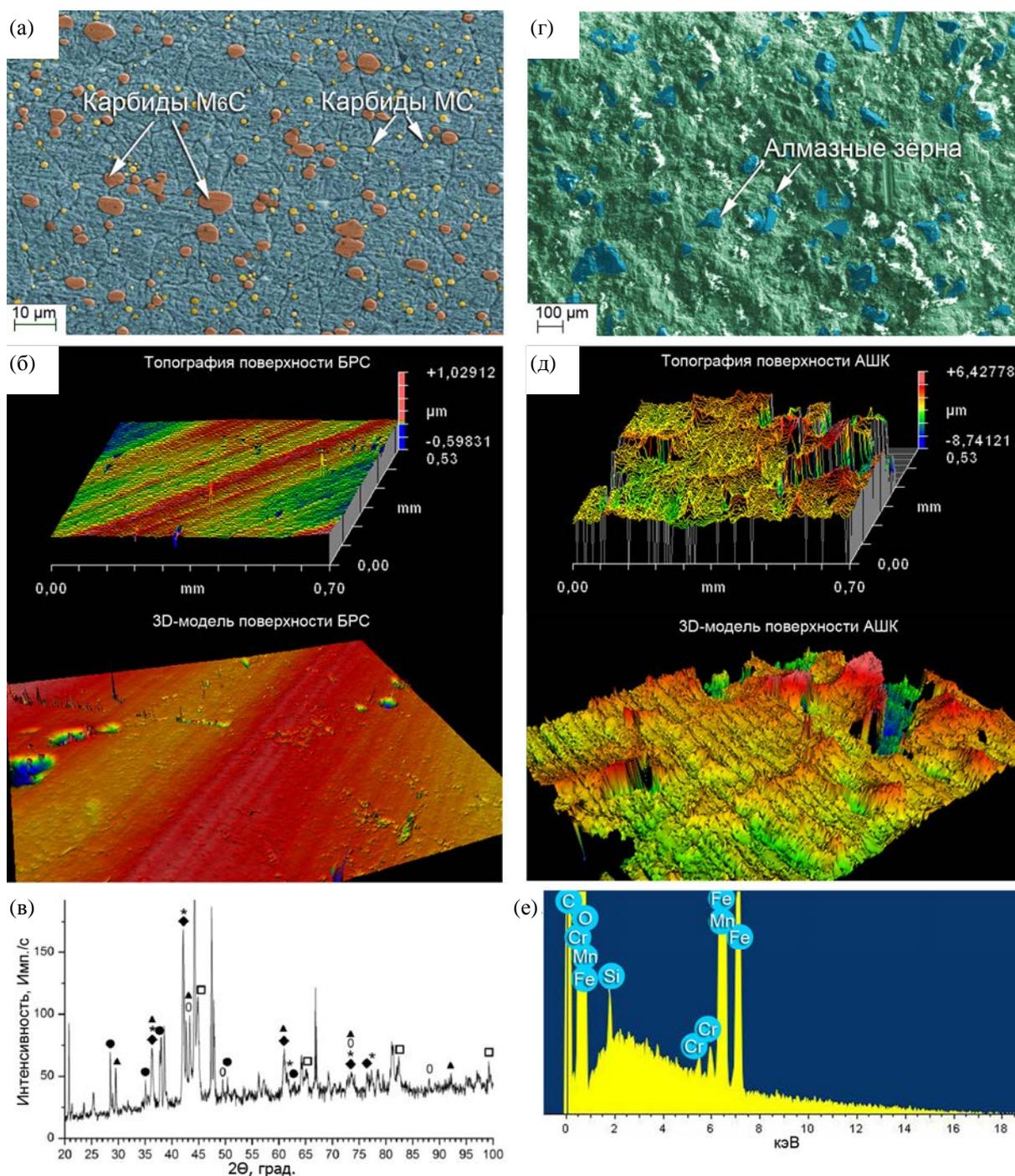


Рис. 1. Методология получения исходных данных для визуализации ювенильных поверхностей; (а) SEM-фотография поверхности БРС; (б) микрорельеф поверхности БРС, полученный средствами оптической интерферометрии; (в) фазовый состав поверхности БРС, полученный рентгеноструктурным анализом, где маркеры означают различные фазы материала; (г) SEM-фотография поверхности АШК; (д) микрорельеф поверхности АШК, полученный средствами оптической интерферометрии; (е) химический состав поверхности АШК, полученный рентгеновским энергодисперсионным анализом

Следовательно, 1 мкм^3 металла с кубической объемноцентрированной решеткой его элементов может содержать более 2×10^{15} атомов. Примем во внимание, что невооруженный человеческий глаз с расстояния 20...25 см способен увидеть точку размером в 0,05 мм. Это расстояние, на-

пример, до экрана монитора ноутбука или до распечатанного изображения, находящегося в руках. Следовательно, масштаб моделируемой статической структуры необходимо подобрать таким образом, чтобы отдельные атомы были вполне различимы.

Однако если атомы визуализировать совсем небольшими, каждый размером $\approx 0,1$ мм, т. е. едва различимые «песчинки», то на итоговом изображении, размер которого при распечатывании превысит 1200×1200 см, они сольются в один мозаичный, «витражный» фон (рис. 2, б). Где в качестве элементов мозаики будут выступать фазы и карбидные зерна микроструктуры.

Если же атомы визуализировать чрезмерно большими (рис. 2, в), то большинство микроструктурных изменений, протекающих в точке контакта ювенильных поверхностей при резании, будут просто не видны, так как будут находиться вне поля зрения. Да и, например, большой масштаб, при котором ребра алмазного зерна будут состоять всего из нескольких десятков атомов, можно применять в качестве лишь демонстрационного, подсобного материала.

Очевидно, что масштаб моделируемой статической структуры может варьироваться в широком диапазоне и должен подбираться самим исследователем исходя из тех конкретных задач, которые стоят перед ним. В нашем случае масштаб подобран таким образом (рис. 2, г), чтобы была возможность для наблюдения тех изменений, которые протекают при резании в фазах и карбидных зернах моделируемой микроструктуры.

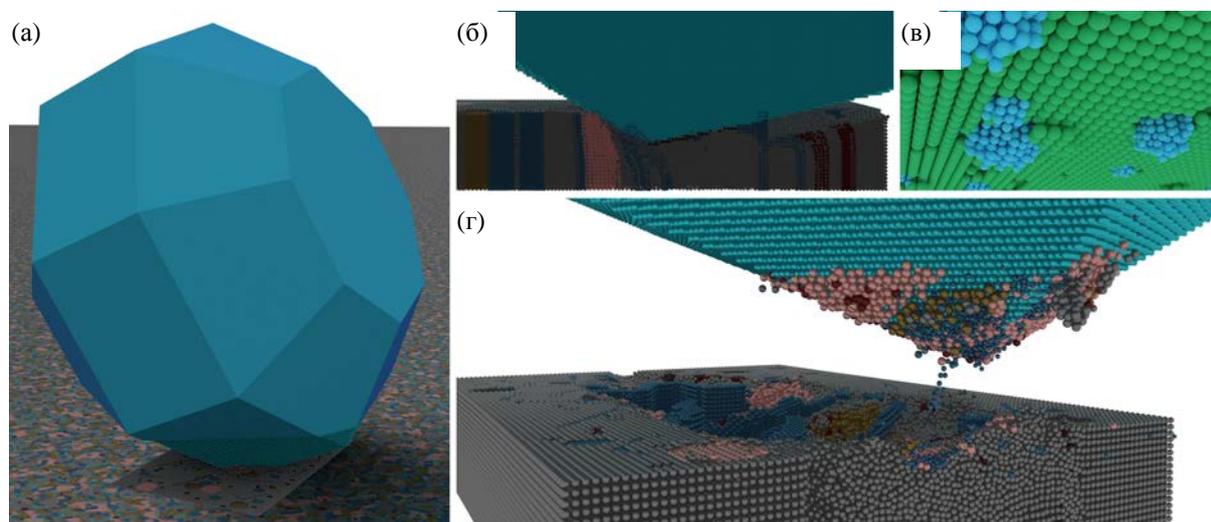


Рис. 2. Подбор масштаба для визуализации статической структуры ювенильных поверхностей; (а) алмазное зерно и поверхность БРС, в масштабе 1:1; (б) пример визуализации структуры с маленькими размерами атомов; (в) пример визуализации структуры с большими размерами атомов; (г) пример визуализации с адекватным для наблюдения размером атомов

Таким образом, проведенная ранее предварительная работа в направлении данных исследований [Попов, Вернигора, 2005; Попов, Труфанов, 2006; Янюшкин и др., 2009; Попов и др., 2014; Попов, Шкуратова, Хлыстов, Бондин, Мирошниченко, 2014; Попов, Ларева, Хлыстов, Бондин, 2015] дала основу для визуализации статической модели алмазных зерен и шлифуемого ими материала при электроалмазной обработке, что в дальнейшем поможет в имитации разнообразных условий физических экспериментов. Полученные данные были сведены в таблицы 1 и 2, отражающие современные знания в области физики твердого тела, необходимые для атомистического моделирования поверхностей.

Известно [Halifa, 2013], что в БРС присутствуют четыре группы карбидов:

- MC , карбидообразующий элемент V ;
- M_2C , карбидообразующий элемент Mo ;
- M_6C , карбидообразующие элементы W и Mo ;
- $M_{23}C_7$, карбидообразующий элемент Cr .

Таблица 1. Исходные данные для атомистического моделирования

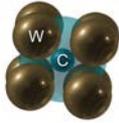
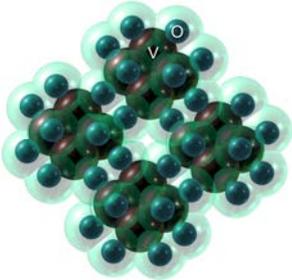
Модель статической структуры	Химический состав		Параметры атомов			Упругие свойства атомов***		
	элемент	% по массе	тип решетки	атомный радиус, нм	ионный радиус**, нм	модуль сдвига E , ГПа	предел прочности δ_b , МПа	модуль сжимаемости K' , Па
АШК	Cu	80	Гранецентрированная кубическая	0,128	0,072	110–130	440	151,03
	Sn	20	Тетрагональный	0,158	0,071	41–55	30	2,715
	C	100	Типа алмаза	0,077	0,26	–	–	–
БРС*	Cr	4,4	Кубическая объемно-центрированная	0,127	0,052	280–315	300	–
	W	6,1		0,141	0,065	350–400	1000	300,09
	V	2,5		0,131	0,052	139–170	5–20	139,42
	Mo	5,0		0,140	0,062	300–330	670	253,1
	Fe	80		0,126	0,064	195–205	290	171,11
	C	0,87		–	0,077	0,26	–	–

* Процент остальных элементов, входящих в состав БРС, а именно Si (0,5 %), Mn (0,3 %), Ni (0,3 %), P и S (по 0,03 %), незначителен. Расчеты и измерения фаз и карбидов подтверждают [Halfa, 2013], что кремний, например, растворяется в матрице и полностью отсутствует в карбидах, поэтому в данных исследованиях ими можно пренебречь.

** Размер ионных радиусов моделируемых металлов не превышает их атомного радиуса, поэтому, располагаясь внутри атома, он не виден «наблюдателям», в отличие от углерода и кислорода.

*** Оценивались предварительно, исходя из соображений назначения кластерам атомов начальных упругих (деформационных) свойств, чтобы кластеры не «разваливались» на последующих этапах и держали заданную форму и конфигурацию.

Таблица 2. Исходные данные для атомистического моделирования статической структуры элементов

Фазы БРС после отжига [Комбинированная электроалмазная обработка..., 2009]					
WC	Cr ₃ C ₂ *	VO ₂ *	W(Mo)	α -Fe	FeCr
					

* Ионные радиусы углерода и кислорода были визуализированы прозрачными сферами для большей наглядности их влияния на адгезионно-диффузионное взаимодействие между элементами.

Предварительная обработка образцов (шлифование, травление [Коваленко, 1981] и т. п.), включая определение химического состава поверхности, рассмотренная в работе [Янюшкин и др., 2009], позволила выявить две группы карбидов MC и M₆C, а также несколько соединений, являющихся основными элементами БРС. После анализа каждому из элементов был присвоен свой цвет. Здесь следует отметить, что назначение того или иного цвета является исключительно дизайнерским приемом, применяемым для более наглядного отражения присутствия этих элементов в сплаве для последующего МД-моделирования.

Таким образом, при МД-моделировании поверхности БРС учитывалось наличие в ее составе шести фаз (см. таблицу 2 и рис. 3), а у АШК двух — алмаза и связки круга (см. таблицу 2 и рис. 4). В данном случае, для более наглядной демонстрации, был выбран большой размер атомов, в то время как для исследовательских целей нам необходим намного меньший их размер.

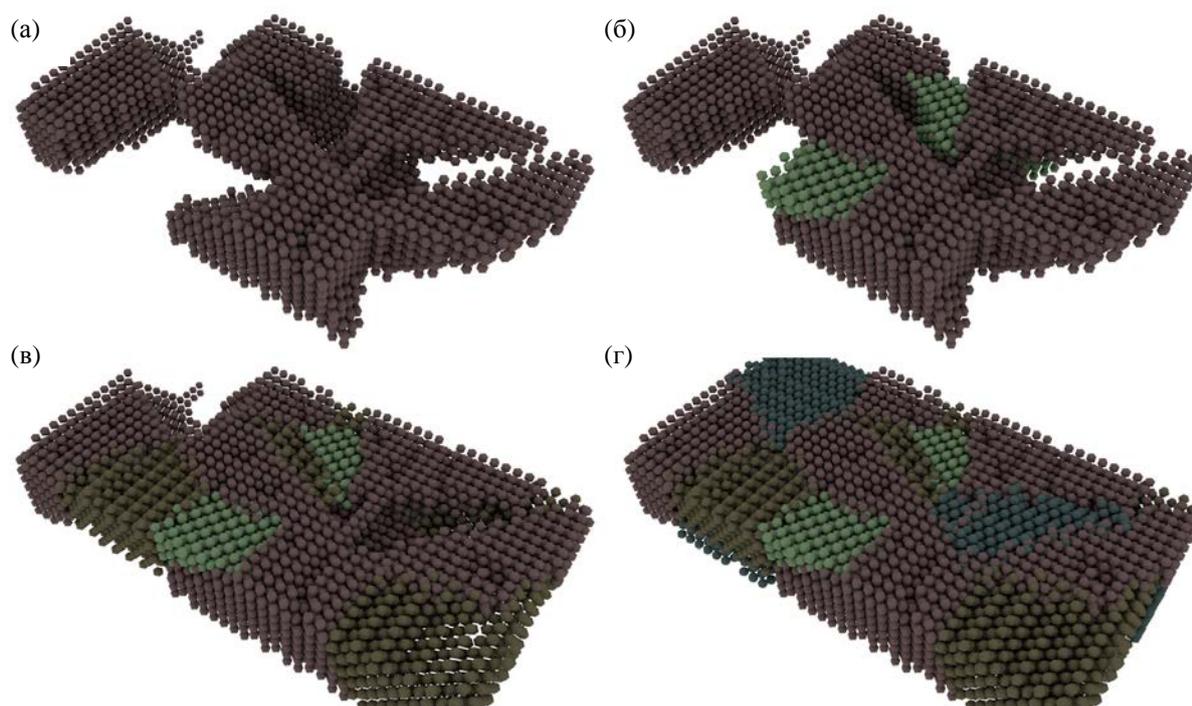


Рис. 3. Методология моделирования статической атомной модели БРС:
 (а) основной элемент БРС — Fe; (б) Fe+V; (в) Fe+V+W; (г) Fe+V+W+C+и т. д.

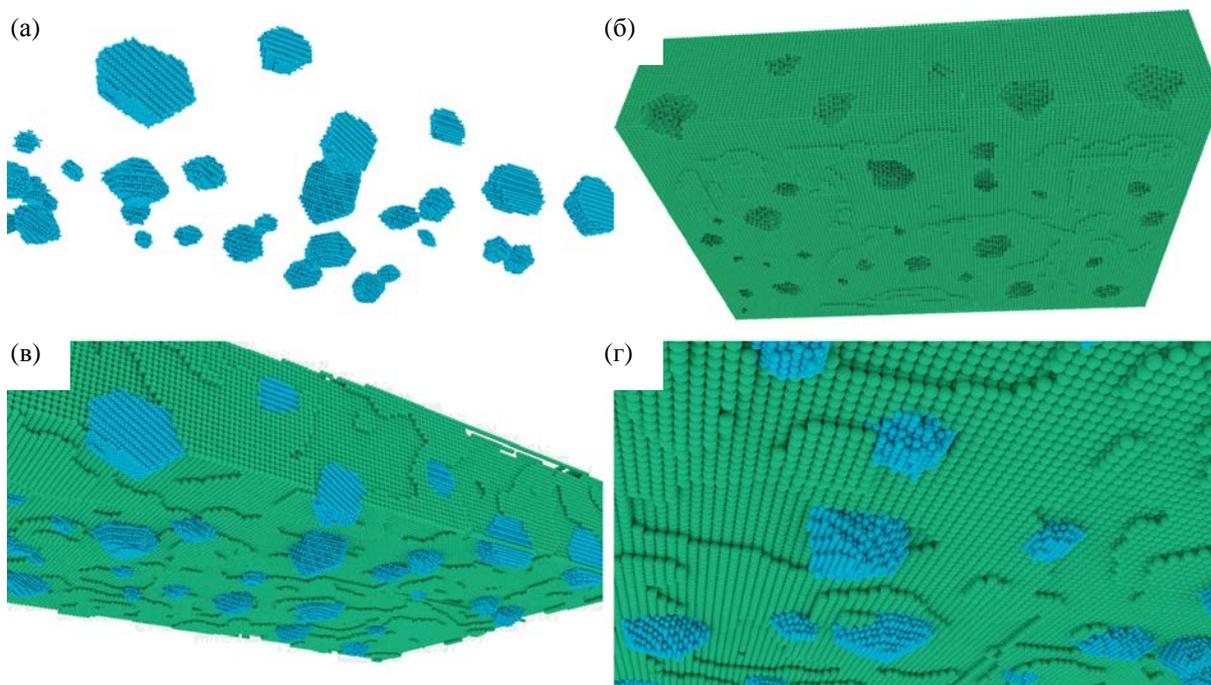


Рис. 4. Методология моделирования статической атомной модели АШК:
 (а) алмазные зерна; (б) металлическая связка круга; (в, г) поверхность АШК

Конечно, в реальных условиях любая поверхность имеет различные неровности, определенную шероховатость, обусловленные теми методами, которыми она до этого обрабатывалась. Например, после электроэрозионной обработки поверхность состоит из множества кратеров или лунок, образовавшихся в результате искровых разрядов. Или, как в нашем случае, поверх-

ность состоит из множества линейных царапин различной глубины (см. рис. 1, б), оставленных алмазными зернами. Единичные кратеры или лунки объясняются тем, что при электроалмазной обработке, основанной на электрохимическом воздействии электрического тока, функцию второго режущего инструмента (после алмазного круга) выполняет сам ток.

Однако первая же визуализация поверхности БРС показала, что если ее модель создать «идеальной», то есть ровной, плоской, то это предоставляет исследователям дополнительные возможности для наблюдения изменений, возникающих при резании. Например, становится возможным одновременное наблюдение за изменениями (деформациями) в структуре исследуемой поверхности, возникающими при разной глубине резания алмазным зерном (рис. 5).

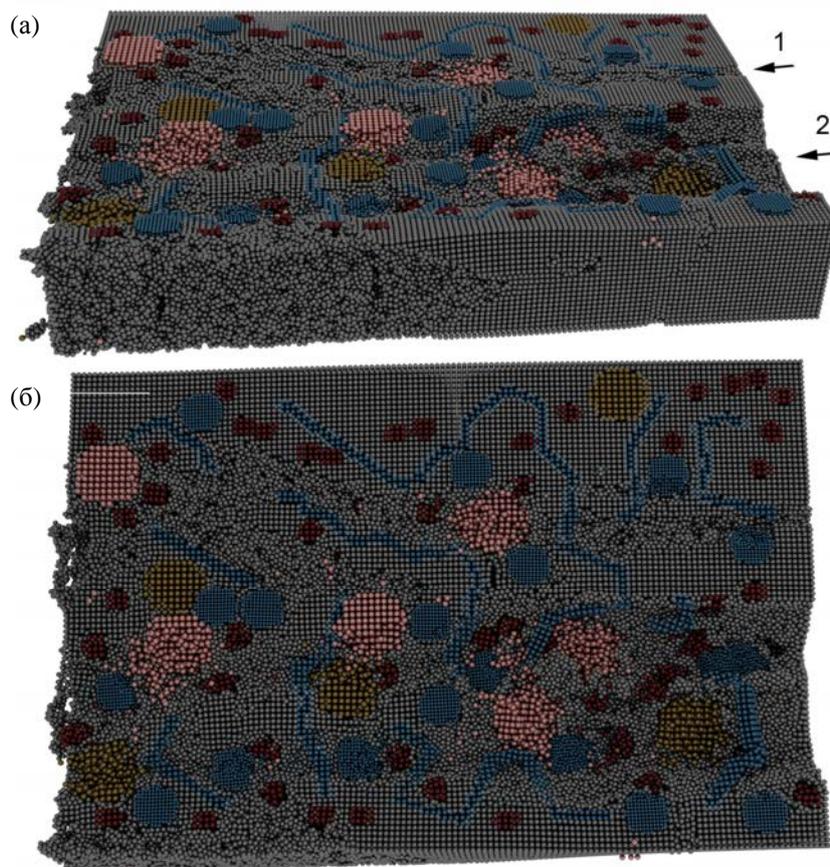


Рис. 5. МД-модель поверхности БРС после алмазного резания: (а) вид сбоку, где 1 — царапина, оставленная алмазным зерном при малой глубине резания, 2 — царапина, оставленная при большой глубине резания; (б) вид сверху

Результаты и обсуждение

Уникальность МД-методов заключается в возможности их применения для моделирования как статических, так и динамических, скоротечных событий, в которых преобладают процессы, невозможные для наблюдения никакими иными инструментальными средствами. Эти методы используют при описании диффузионных процессов в примесях и сплавах, описании всевозможных дефектов кристаллического строения материалов, а также фазовых превращений в твердом веществе под воздействием факторов высокой температуры и давления. Анализ полученных при МД-моделировании данных дает ясную картину о механизмах изменений в составе и структуре материалов на атомистическом уровне, предоставляет способность обеспечить информацией о динамике исследуемой системы или событиях, которые происходят в те-

чение нескольких пикосекунд, например, при атомных столкновениях «кластер–поверхность» или росте защитных пленок.

По результатам данной работы МД-модель АШК включает (рис. 4; рис. 6, б) две кристаллические структуры (алмаз и связка круга) и содержит около 500 тысяч атомов, а МД-модель БРС включает шесть кристаллических структур и содержит около 270 тысяч атомов (рис. 2, з; рис. 5; рис. 6, з).

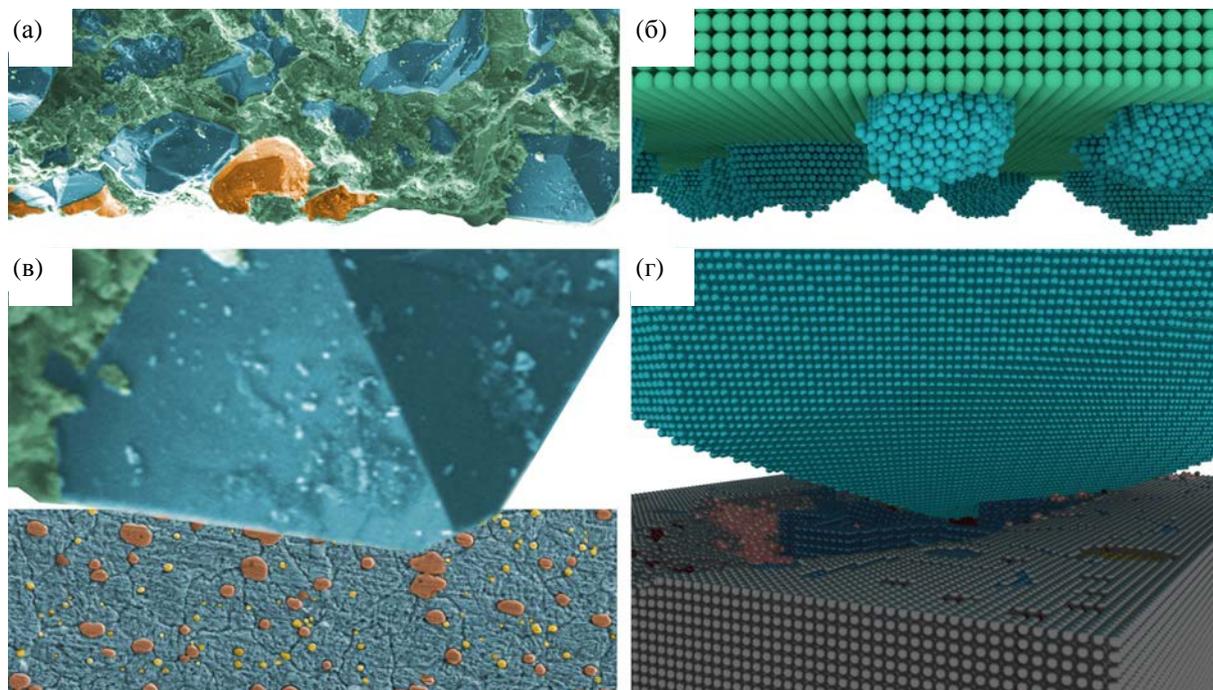


Рис. 6. Результат визуализации статического атомного моделирования ювенильных поверхностей: (а) SEM-фотография АШК; (б) упрощенная МД-модель АШК; (в) SEM-фотография алмазного зерна и поверхности БРС в масштабе 1:1; (г) уточненные МД-модели алмазного зерна и поверхности БРС

Однако в процессе развития данного исследования в дальнейшем было принято решение отказаться от упрощенной модели визуализации в пользу уточненной (рис. 2, з; рис. 6, з). Это связано с тем, чтобы на следующем этапе — визуализации контактного взаимодействия созданных моделей в динамике — максимально приблизить моделируемый процесс резания алмазным зерном к реальному. Визуализация уточненной статической модели алмазного зерна (рис. 2, з; рис. 6, з) содержит более 700 тысяч атомов, что в дальнейшем позволит увеличить глубину проникновения модели алмазного в модель БРС. Этого количества достаточно для того, чтобы считать, что поставленная в исследовании цель МД-моделирования ювенильных поверхностей при шлифовании была достигнута.

Для следующего этапа — получения видеоролика момента контакта поверхностей — модели были разделены на динамические области, на которых моделируется динамическое взаимодействие поверхностей, моделируются изменения в кристаллической структуре фаз БРС и т. п., а также на статические (фиксированные) области, на которых динамика будет отсутствовать.

Выводы

1. В результате исследований, выполненных авторами и представленных в настоящей работе, на основе сбора данных по созданию статической атомной модели двух поверхностей, контактирующих при электроалмазной обработке: алмазных зерен и шлифуемого ими материала, была решена задача выбора начальной конфигурации моделируемой системы. Эта часть ра-

боты заключалась в моделировании полигональных объектов, источников частиц; в размещении моделей на сцене; в создании системы частиц для каждой модели; в настройке частиц с заполнением под соответствующую кристаллическую решетку; в интерпретации известных свойств атомов к соответствующим частицам в программе Blender; в задании свойств для систем частиц; в процессе расчета траекторий движения частиц; в анализе результата и рендер изображения.

2. Для проверки адекватности моделирования проводилось сравнение профилей, полученных после электроалмазной обработки и МД-моделирования. Сравнение показало достаточно хорошее совпадение параметров поверхностей.

3. Статическая модель поверхности БРС, то есть основная поверхность, на которой будут проводиться следующие этапы моделирования, показала параметры, которые находятся в хорошем согласии с экспериментальными наблюдениями, полученными как авторами работы, так и другими исследователями.

4. Дальнейшим развитием атомной визуализации является моделирование динамики взаимодействия контактирующих поверхностей с учетом взаимодействия межмолекулярных связей. Эта часть работы заключается в анализе полученных результатов и рендере видео на основе уточненных свойств для каждой системы частиц с запуском процесса расчета траекторий их движения.

Список литературы

- Андерсон Р. Экспериментальные методы исследования катализа / Пер. с англ. — М.: Мир, 1972. — 480 с.
- Баландин А. А., Рубинштейн А. М. Катализ: физико-химия гетерогенного катализа / Пер. с англ. — М.: Мир, 1967. — 480 с.
- Батгэрэл Б., Никонов Э. Г., Пузынин И. В. Моделирование взаимодействия нейтральных металлических нанокластеров при соударении с металлической поверхностью // Вестник Российского университета дружбы народов. Сер.: Математика, информатика, физика. — 2013. — № 4. — С. 65–79.
- Братков А. А. Теоретические основы химмотологии / Под ред. А. А. Браткова. — М.: Химия, 1985. — 315 с.
- Грабченко А. И., Федорович В. А. 3D-процессы алмазно-абразивной обработки: Монография. — Харьков: НТУ «ХПИ», 2008. — 345 с.
- Ельцов К. Н., Климов А. Н., Косяков А. Н., Обьедков О. В., Юров В. Ю., Шевлюга В. М. Сверхвысоковакуумный сканирующий туннельный микроскоп GPI-300 // Труды ИОФАН. — 2003. — Т. 59. — С. 45–63.
- Епифанов Г. И. Физика твердого тела: Учебное пособие. — СПб.: Лань, 2011. — 288 с.
- Коваленко В. С. Металлографические реактивы. 3-е изд., перераб. и доп. — М.: Металлургия, 1981. — 120 с.
- Козлов Э. В., Иванов Ю. Ф., Симонов П. С., Ладыжец Н. В. Фазовый состав и тонкая структура стали Р6М5 // Ползуновский альманах. — 2004. — № 4. — С. 47–51.
- Колесников В. И., Мигаль Ю. Ф., Новиков Е. С., Колесников И. В. Моделирование процессов трения и изнашивания на атомном уровне // Вестник Ростовского государственного университета путей сообщения. — 2012. — № 3. — С. 162–168.
- Куксин А. Ю., Ланкин А. В., Морозов И. В., Норманн Г. Э., Орехов Н. Д., Писарев В. В., Смирнов Г. С., Стариков С. В., Стегайлов В. В., Тимофеев А. В. Зачем и какие нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса? Предсказательное моделирование свойств и многомасштабных процессов в материаловедении // Программные системы: теория и приложения. — 2014. — Т. 5, № 1-1 (19). — С. 191–244.
- Лодиз Р., Паркер Р. Рост монокристаллов / Пер. с англ. — М.: Мир, 1974. — 540 с.
- Медведева О. И., Янюшкин А. С., Попов В. Ю. Расчет энергии адгезии контактных поверхностей при шлифовании инструментальных материалов различными методами // Научные технологии в машиностроении. — 2014. — № 5 (35). — С. 14–19.

- Нагорнов Ю. С. Численные методы моделирования свойств нанокристаллов. Учебное пособие. — Тольятти, 2012. — 86 с.
- Новоселов И. И., Куксин А. Ю., Янилкин А. В. Энергии образования и структуры точечных дефектов на межзеренных границах наклона в молибдене // Физика твердого тела. — 2014. — Т. 56, № 7. — С. 1349–1355.
- Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. — 2012. — Т. 24, № 6. — С. 3–44.
- Попов В. Ю., Большаков И. М., Гуглин Г. С., Распутин Е. В. Исследование процесса засаливания алмазных шлифовальных кругов на металлической связке при обработке быстрорежущей стали Р6М5 // Механики XXI века. — 2010. — № 9. — С. 101–104.
- Попов В. Ю., Вернигора М. Ю. Компьютерная визуализация процесса электроалмазной обработки // Механики XXI века. — 2005. — № 4. — С. 265–267.
- Попов В. Ю., Труфанов Р. В. Компьютерная визуализация процесса электроалмазной обработки в 3D Studio Max // Механики XXI века. — 2006. — № 5. — С. 312–313.
- Попов В. Ю., Шкуратова А. П., Хлыстов А. Н., Бондин А. В., Мирошниченко Н. А. 3D-моделирование процесса комбинированной электроалмазной обработки // Труды Братского государственного университета. Сер.: Естественные и инженерные науки. — 2014. — Т. 1. — С. 201–207.
- Попов В. Ю., Ларева А. П., Хлыстов А. Н., Бондин А. В. Моделирование процесса комбинированной электроалмазной обработки в среде Blender 3D // Труды Братского государственного университета. Сер.: Естественные и инженерные науки. — 2015. — Т. 1. — С. 187–191.
- Попов В. Ю., Шкуратова А. П., Хлыстов А. Н., Бондин А. В., Мирошниченко Н. А. Методика компьютерного моделирования процессов комбинированной электроалмазной обработки // Механики XXI века. — 2014. — № 13. — С. 91–96.
- Попов В. Ю., Янюшкин А. С. Исследование поверхности алмазных кругов после комбинированной электроалмазной обработки быстрорежущей стали // Технология машиностроения. — 2013. — № 11. — С. 26–30.
- Попов В. Ю., Янюшкин А. С. Формирование поверхностного слоя режущего инструмента при алмазной обработке кругами на металлической связке // Решетневские чтения. — 2014. — Т. 1, № 18. — С. 306–308.
- Попов В. Ю., Янюшкин А. С., Андронов А. Ю. Результаты комплексного изучения состава засаленного слоя алмазных кругов // Системы. Методы. Технологии. — 2014. № 1 (21). — С. 114–120.
- Попов В. Ю., Янюшкин А. С., Медведева О. И., Скиба В. Ю. Контактные процессы при алмазной обработке инструментальных материалов // Системы. Методы. Технологии. — 2014. — № 3 (23). — С. 68–74.
- Попов В. Ю., Янюшкин А. С., Сурьев А. А. Качество инструмента из инструментальных сталей после обработки методом двойного травления // Труды Братского государственного университета. Сер.: Естественные и инженерные науки. — 2003. — Т. 2. — С. 206–212.
- Прогноз научно-технологического развития Российской Федерации на долгосрочную перспективу (до 2030 г.) (концептуальные подходы, направления, прогнозные оценки и условия реализации). РАН. — М., 2008. — 88 с.
- Прогноз развития научных и технологических направлений, имеющих значительный прикладной потенциал в долгосрочной перспективе, представленный институтами РАН. Приложение 1. — Москва, 2005. — 148 с.
- Терентьев Д. А., Малерба Л., Журкин Е. Е., Космач В. Ф. Исследование механизмов диффузии матричных, межузельных и примесных атомов в твердом растворе Fe–Cr при высоких температурах методом классической молекулярной динамики // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2005. — № 10. — С. 60–67.
- Толстогузов А. Б. Атомно-зондовая масс-спектрометрия // Масс-спектрометрия. — 2009. — Т. 6, № 4. — С. 280–288.
- Томас Дж., Томас У. Гетерогенный катализ / Пер. с англ. — М.: Мир, 1969. — 452 с.

- Физические величины: Справочник / А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский и др.; Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. — М.: Энергоатомиздат, 1991. — 1232 с.
- Хараев Ю. П., Гурьев А. М., Попова Н. А., Сизоненко Н. Р., Козлов Э. В.* Сопоставление фазового состава сталей P18 и P6M5 в отожженном состоянии // Ползуновский вестник. — 2005. — № 2. — С. 184–188.
- Холмуродов Х. Т., Алтайский М. В., Пузынин И. В., Дардин Т., Филатов Ф. П.* Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // Физика элементарных частиц и атомного ядра. — 2003. — Т. 34, № 2. — С. 474.
- Янюшкин А. С., Медведева О. И., Янюшкин С. А., Попов В. Ю.* Физико-химическое взаимодействие инструментального и обрабатываемого материалов при комбинированном электрохимическом шлифовании // Труды Братского государственного университета. Сер.: Естественные и инженерные науки. — 2012. — Т. 1. — С. 183–190.
- Янюшкин А. С., Попов В. Ю., Васильев Е. В., Попов А. Ю.* Комбинированная электроалмазная обработка инструментальных сталей: Монография. — Братск: БрГУ, 2009. — 228 с.
- Янюшкин А. С., Попов В. Ю., Медведева О. И., Ковалевский С. В., Рычков Д. А.* Электроалмазная обработка высокопрочных материалов с нанесением защитных покрытий // Системы. Методы. Технологии. — 2013. — № 3 (19). — С. 125–129.
- Halfa H.* Thermodynamic Calculation for Silicon Modified AISI M2 High Speed Tool Steel // Journal of Minerals and Materials Characterization and Engineering. — 2013. — No. 1. — P. 257–270.
- Kholmurodov K., Ebisuzaki T., Puzynin I., Smith W., Yasuoka K.* MD simulation of cluster-surface impacts for metallic phases: soft landing, droplet spreading and implantation // Computer Physics Communications. — 2001. — Vol. 141, No. 1. — P. 1–16.