

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения
Российской академии наук

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**Перспективные материалы
с иерархической структурой
для новых технологий
и надежных конструкций**

21 - 25 сентября 2015 г.

Томск, Россия

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЛАПСА ПОЛОГО ТОЛСТОСТЕННОГО ЦИЛИНДРА

Никонов А.Ю.

*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия,
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия
nikonov@usgroups.com*

Несмотря на достигнутый определённый прогресс, связанный с использованием, как современных экспериментальных методов исследования, так и новых теоретических подходов, вопросу изучения особенностей локализации пластической деформации в кристаллических материалах по-прежнему уделяется пристальное внимание. Повышенный интерес вызван тем, что понимание основных механизмов пластического деформирования кристаллических тел напрямую связано с возможностью управления их прочностными и деформационными характеристиками. Следует отметить, что чаще всего явление локализации деформации рассматривается для случаев больших степеней, высоких скоростей и температур деформирования. Это проявляется в виде формирующихся стационарных полос, называемых также термином «shear bands» и представляющих собой области материала, в которых скорости деформации намного выше скоростей деформации в остальных объёмах. Образование «shear bands» играет решающую роль при дальнейшем деформировании, поскольку в большинстве случаев они являются предвестником разрушения материала. В то же время известно, что по мере роста деформации масштаб проявления её локализации изменяется от блока к зерну, от зерна, к комплексу зёрен и далее к образцу в целом. Таким образом, этот процесс является многоуровневым. Следовательно, начальный этап зарождения и развития процесса локализации деформации неразрывно связан с особенностями отклика материала на нагрузку на микромасштабе. При переходе на микромасштаб большое значение приобретают исследования, проводимые на монокристаллах. Поскольку для экспериментального решения данной задачи необходима трудоёмкая подготовка соответствующих монокристаллических образцов, то с учётом малости их пространственных масштабов данный вопрос может быть эффективно исследован с использованием современных методов компьютерного моделирования. Таким образом, целью настоящей работы являлось теоретическое исследование зарождения и развития процесса локализации деформации на масштабе отдельных атомов в полном цилиндрическом образце в условиях высокоскоростного осесимметричного нагружения.

Обнаружено, что сжимающая деформация при достижении определённого значения приводит к образованию на внутренней поверхности цилиндра дефектов упаковки. По мере нагружения

моделируемого образца число дефектов упаковки растёт, и они распространяются от внутренней свободной поверхности, где достигаются максимальные значения деформации, в объём материала. Была проведена оценка величин деформаций, при которых в кристаллитах возникают локализованные атомные смещения. Согласно приведённым результатам деформация различных частей цилиндра до момента зарождения полос согласованных атомных смещений носит преимущественно однородный характер. Поведение областей кристаллита вблизи внутренней свободной поверхности в большей степени определяется особенностями структурной перестройки кристаллической решётки вследствие осесимметричного сжатия.

Разработанная компьютерная модель осесимметричного динамического нагружения кристаллита меди на масштабном уровне отдельных атомов показала хорошее согласие результатов моделирования с экспериментальными данными по взрывному нагружению монокристаллов меди. Таким образом, предложенная численная модель может быть использована для исследования особенностей зарождения и развития пластической деформации в кристаллических материалах.

ОСОБЕННОСТИ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОЦК И ГЦК МЕТАЛЛОВ

Никонов А.Ю.^{1,2}, Дмитриев А.И.^{1,2}, Абрикосов И.А.³

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия,*

²*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия,*

³*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия
nikonov@usgroups.com*

Известно, что контактное взаимодействие кристаллических материалов приводит к микроструктурным изменениям вблизи границы раздела, вызванным взаимным влиянием атомных подсистем взаимодействующей пары. Ситуация осложняется тем, что эти изменения связаны между собой и могут влиять друг на друга. Это обуславливает значительный интерес использования различных методов экспериментального изучения, а также методов вычислительного подхода для изучения и анализа процессов, протекающих в поверхностных слоях твёрдого тела. Результаты, полученные в ходе моделирования, позволяют лучше понять механизмы контактного взаимодействия, что даёт возможность целенаправленного воздействия на структуру и состав поверхностных слоёв фрикционных материалов с целью повышения и совершенствования их эксплуатационных характеристик. Целью настоящей работы было изучить особенности развития процессов деформации и разрушения тонких поверхностных слоёв, реализуемых в условиях фрикционного контакта на наноскопическом масштабе.