ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

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

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/135

**ПОСТРОЕНИЕ ФУНКЦИЙ ОТКЛИКА ДЛЯ МЕЗОМАСШТАБНЫХ ЧАСТИЦ CU, FE
И C НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

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

¹*Томский государственный университет, Томск*

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

Одной из ключевых проблем методов моделирования на мезо и макро масштабах является выбор параметров, описывающих взаимодействие между отдельными элементами среды. Эффективным способом решения этой проблемы может быть использование методов моделирования атомного уровня. В настоящей работе с целью определения параметров взаимодействия частиц мезомасштабного уровня методом молекулярной динамики были исследованы основные закономерности развития процесса пластического деформирования материалов с тремя различными типами кристаллической структуры. Моделировались кристаллиты в условиях сдвига, а так же одноосного сжатия и растяжения. Получаемые при этом зависимости напряжения от приложенной деформации были использованы в качестве входных параметров для метода подвижных клеточных автоматов. Исследовались исходно бездефектные кристаллиты меди, альфа-железа и углерода, которые представляют три типа кристаллической решётки: ГЦК, ОЦК и гексагональной кристаллической. Для проведения молекулярно-динамических расчётов использовался программный пакет LAMMPS[1]. Визуализация и анализ атомной структуры моделируемых образцов проводились в программе OVITO [2]. Расчёты были проведены для различных ориентаций кристаллических решёток относительно направления нагружения. Анализировалась перестройка атомной структуры в процессе пластической деформации, а также рассчитывались диаграммы нагружения.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 гг. (Проект III.23.2.4).

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. Vol. 117. No. 1. P. 1–19.
2. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol. 18. No. 1. P. 15012.