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: 10.17223/9785946218412/141

**ОСОБЕННОСТИ ПЕРЕСТРОЙКИ ПРИ ПОВЕРХНОСТНОЙ СТРУКТУРЕ
ПОЛИКРИСТАЛЛА МЕДИ НА АТОМНОМ МАСШТАБЕ ПРИ ЛОКАЛЬНОМ
ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ**

^{1,2}Никонов А.Ю., ^{1,2}Жармухамбетова А.М.

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Современная промышленность очень требовательна к характеристикам материалов, применяемых в производстве. Существует множество способов модификации свойств материалов для получения необходимых параметров (легирование, закалка, отжиг, равноканальное угловое прессование и др.). Однако в большинстве случаев достаточно изменять свойства материала только вблизи поверхностного слоя, поскольку он испытывает основные нагрузки. Такая процедура является менее трудозатратной и активно используется в промышленности. Поэтому вопросу изучения физико-механических свойств поверхности и улучшению её характеристик путём применения различных способов обработки уделяется пристальное внимание. Несмотря на постоянное совершенствование методов экспериментального изучения, особенности эволюции структуры, при которых происходят эти изменения, по-прежнему остаются малоизученными. Эффективным решением этой проблемы, прослеживаемым в современной литературе, является применение, в сочетании с экспериментом, различных методов численного моделирования. Метод молекулярной динамики для большинства задач атомного масштаба, по-прежнему, остаётся основным инструментом теоретического описания поведения моделируемой системы. Он позволяет изучать эволюцию атомной подсистемы в условиях динамического нагружения с явным заданием внутренней структуры поликристаллического материала. Таким образом, целью работы было изучение с применением метода молекулярной динамики особенностей зарождения и развития структурных дефектов в поликристаллическом материале в условиях локализованного поверхностного пластического деформирования.

Молекулярно-динамические расчёты проводились с использованием программного пакета LAMMPS[1]. В качестве объекта исследования был выбран фрагмент поликристалла меди, исходно состоящий из четырёх зёрен, разделённых плоскими дефектами типа большеугловой симметричной границы $\Sigma=5$ (210)[001]. Локализованное сдвиговое нагружение реализовывалось путём моделирования контакта поверхности микровыступа с контртелом, в качестве которого выступал абсолютно жёсткий индентор. Рассматривалось 2 варианта ориентации кристаллической решётки зёрен. Для анализа изменений в структуре моделируемого поликристалла применялась программа OVITO [2].

Результаты компьютерного моделирования на масштабе отдельных атомов позволили выявить механизмы пластического деформирования материала с внутренней структурой в условиях локального сдвигового нагружения. Согласно результатам анализа структуры этот процесс происходит путём формирования частичных дислокаций Шокли, которые возникают вблизи области контакта образца с индентором и распространяются вглубь поликристалла. Это приводит к формированию системы многочисленных пересекающихся плоских дефектов – дефектов упаковки. Кроме того, было обнаружено ранее [3], в результате локального сдвигового нагружения происходит перемещение границ зёрен в объёме образца. Движение и взаимодействие границ зёрен, в свою очередь, может приводить к рекристаллизации приповерхностного слоя материала.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации № МК-3640.2019.2.

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.
3. Дмитриев А.И., Никонов А.Ю., Скоробогатов А.С., Кузнецов В.П., Колубаев Е.А. Моделирование поведения кристаллита с межзеренной границей в условиях локального сдвигового нагружения // Современные проблемы науки и образования. 2014. № 6.; URL: <http://www.science-education.ru/ru/article/view?id=15953> (дата обращения: 20.06.2019).