ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«Физическая мезомеханика.

**Материалы с многоуровневой иерархически
организованной структурой и интеллектуальные
производственные технологии»,**

посвященная 90-летию со дня рождения
основателя и первого директора ИФПМ СО РАН
академика Виктора Евгеньевича Панина

в рамках

**Международного междисциплинарного симпозиума
«Иерархические материалы: разработка и приложения
для новых технологий и надежных конструкций»**

**5–9 октября 2020 года
Томск, Россия**

Томск
Издательство ТГУ
2020

DOI: 10.17223/9785946219242/118

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ
ПЕРЕСТРОЙКИ ПРИПОВЕРХНОСТНОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИКРИСТАЛЛА
ЖЕЛЕЗА ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ДИНАМИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ**

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

¹НИИ Томский 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, однако в большинстве случаев достаточно изменять свойства только вблизи поверхностного слоя, поскольку он испытывает основные нагрузки. 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 является применение, в сочетании с экспериментом, различных методов численного моделирования. Метод молекулярной динамики является одним из основных инструментов теоретического описания поведения материала на атомном масштабе. 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 α -железа. В первом варианте образец состоял из четырёх зёрен, разделённых плоскими дефектами типа большеугловой симметричной границы. Рассматривались следующие границы зёрен: $\Sigma 5$ (120)[001] и $\Sigma 9$ (114)[110]. Во втором случае рассматривался образец, состоящий из 12 зёрен со случайно заданной ориентацией кристаллической решётки. Локализованное сдвиговое нагружение реализовывалось путём моделирования контакта поверхности микровыступа с контртелом, в качестве которого выступал абсолютно жёсткий индентор радиусом 6,5 нм и 13 нм. Для образца из 4 зёрен рассматривалось 2 варианта ориентации кристаллической решётки зёрен относительно направления нагружения.

Анализ результатов компьютерного моделирования на масштабе отдельных атомов показал, что основным механизмом пластического деформирования материала является формирование дислокаций. Кроме того, в образцах с границей зёрен $\Sigma 9$ наблюдалось зернограничное проскальзывание, которое сопровождалось перестройкой атомной структуры, приводящей к росту одного зерна за счёт атомов другого. Подобный эффект перемещения границы зёрен описывался ранее в работе [2]. 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. Dmitriev A.I., Nikonov A.Yu. Features of The $\Sigma 5$ and $\Sigma 9$ grain boundaries migration in BCC and FCC metals under shear loading – A molecular dynamics study // FU Mech Eng. – 2017. – Vol.15. – No. 2. – P. 285-294.