

# **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: 10.17223/9785946219242/119

**ПЛАСТИЧЕСКАЯ ДЕФОРМАЦИЯ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЁВ  
МОНОКРИСТАЛЛА МЕДИ В УСЛОВИЯХ СКОЛЬЖЕНИЯ БЕЗ СМАЗКИ.  
МОЛЕКУЛЯРНО ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ**

Никонов А.Ю., Дмитриев А.И.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Неоднородный характер пластической деформации можно наблюдать уже при условии одноосных схем испытаний, таких как испытания на растяжение и сжатие, поэтому для обеспечения однородности деформации должны применяться некоторые специальные меры предосторожности, такие как, например, испытание на сжатие в канале. Неоднородность деформации при испытании на сжатие обусловлена тем фактом, что концы образца контактируют с пластинами испытательной машины, и, несмотря на использование смазки, существуют квазистатические силы трения, направленные от периферии образца к его центру. Дополнительная нагрузка образца силами трения скольжения добавляет неоднородность к развитию деформации, так что она локализуется в основном ниже изношенной поверхности. Применение метода молекулярной динамики позволяет исследовать процессы, протекающие в объёме образца в сложных условиях нагружения, когда действует несколько разнонаправленных сил. Целью данной работы является изучение с использованием методов компьютерного моделирования неоднородной деформации в монокристаллах меди в условиях нагружения «сжатие+сдвиг», оценка влияния ориентации кристаллической решётки образца относительно нагружения и свободных граней кристаллита.

Моделирование в рамках метода молекулярной динамики проводилось с использованием программного пакета LAMMPS [1]. В качестве объекта исследования был выбран монокристалл меди размерами  $40a \times 60a \times 40a$ , где  $a$  – параметр решётки, вдоль направлений X, Y, и Z лабораторной системы координат. Рассматривались четыре варианта кристаллографической ориентации решётки образца, а именно: направления сил давления/трения совпадали для (1) с  $[110]/[\bar{1}11]$ , (2) –  $[110]/[1\bar{1}2]$ , (3) –  $[\bar{1}11]/[110]$  и (4) –  $[1\bar{1}\bar{1}]/[1\bar{1}2]$ , соответственно. Одноосное сжатие задавалось путём движения верхнего слоя атомов толщиной 3 межатомных расстояния с постоянной скоростью  $V_{\text{press}} = 10$  м/с. Для имитации трения образца с подложкой моделировалось движение атомов подложки с постоянной скоростью  $V_{\text{friction}} = 50$  м/с. Величина силы трения варьировалась заданием дополнительно к межатомным силам притяжения силы отталкивания между образцом и подложкой, которая была пропорциональна квадрату расстояния.

Анализировалось образование дефектов структуры в объёме образца на различных этапах нагружения. Согласно полученным результатам процесс пластической деформации монокристаллов меди при скольжении состоит из трёх этапов, которые условно можно обозначить как формирование полосы первичной системы скольжения, формирование полосы вторичной системы скольжения и расширенная деформация.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 гг. (Проект III.23.2.4) и РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 18-48-700009.*

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. – 1995. – Vol. 117. – No. 1. – P. 1-19.