

Компьютерное моделирование на атомном уровне
нанокристаллических металлов.

Atomistic simulations in nanocrystalline metals.

М. З. Борисова – вед. инженер, С.П. Яковлева – ктн., рук. отдела
Институт физико-технических проблем Севера СО РАН

Нанокристаллические металлические материалы обладают рядом уникальных свойств. Повышенные прочностные свойства наряду с сохранением пластичности этих материалов дают им неоспоримое преимущество перед обычными крупнозернистыми материалами. Это обусловлено масштабными эффектами, вызванным малым размером зерна и значительной долей границ зерен. В то время как в поликристаллических материалах, с размером зерна порядка нескольких мкм, пластическая деформация имеет дислокационную природу, в наноматериалах плотность дислокаций в объеме зерна крайне низка и большую роль при деформации играет зернограничная фаза.

Для понимания элементарных актов и механизмов развития пластической деформации в нанокристаллических материалах возможно применение компьютерного моделирования на атомном уровне высокой размерности. Для чистых материалов, для которых известны значения межатомного потенциала, проводится молекулярно-динамическое компьютерное моделирование, рассматривающее структуру на атомном уровне. Образцы разрабатываются с использованием стохастической процедуры, другими словами объем моделируемой ячейки заполняется нанозернами с произвольным расположением и ориентацией, в соответствии с конструкцией Воронова. Образцы содержат от $6 \cdot 10^6$ атомов, в зависимости от размера зерна (max. 20 нм) и от числа зерен (min. 125 зерен). При моделировании механических свойств наноматериалов согласуются внутризеренные (дислокационные) и межзеренные (зернограничное проскальзывание) механизмы деформации. При малых размерах зерна дислокации не могут войти в объем зерна из-за больших энергетических затрат, связанных с преодолением сил линейного натяжения. В образцах с размером зерен 12 нм и выше наблюдается аккомодационный механизм деформации: эмиссия и скольжение дислокаций. С увеличением размера зерна происходит смена основного механизма деформации – от зернограничного проскальзывания к дислокационному. Наиболее вероятным механизмом при низких температурах представляется зернограничное проскальзывание. Таким образом, задавая размер зерна и температуру испытания можно рассчитать напряжение течения на определенной стадии процесса деформации. Моделирование на атомном уровне раскрывает связи структурных особенностей материалов с их механическими свойствами, позволяет предсказать и объяснить экспериментальные данные и дает новую почву для развития теоретических знаний о материи.

Регистрационная форма

Фамилия, имя, отчество	Борисова Мария Захаровна
Ученая степень	-
Учреждение, должность	Институт физико-технических проблем Севера СО РАН, ведущий инженер
Фамилия, имя, отчество	Яковлева Софья Петровна
Ученая степень	к.т.н.
Учреждение, должность	Институт физико-технических проблем Севера СО РАН, руководитель отдела
E-mail	borisova_maria@yahoo.de
Название доклада	Компьютерное моделирование на атомном уровне нанокристаллических металлов.
Название направления	Компьютерное моделирование в науке и технике
Оплата целевого взноса участника конференции (сумма, номер платежного документа, дата оплаты)	