

РЕФЕРАТ

Дипломна робота: 101 с., 10 табл., 34 рис., 59 джерел.

МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, ВІЛЬНА ПОВЕРХНЯ, МОДЕЛЮВАННЯ,
ПОВЕРХНЕВА РЕЛАКСАЦІЯ, ПЛОСКОШАРОВА СИСТЕМА,
МОНОКРИСТАЛ ТИТАНУ, ГРАФЕН.

Об'єкт дослідження – процеси структурних змін в поверхневих шарах Ti під дією плівки графену.

Мета роботи – теоретично дослідити вплив плівки графену на структурні зміни та напруження в поверхневих шарах Ti на гранях (0001), (11 $\bar{2}$ 0), (1 $\bar{1}$ 00).

Методи дослідження – метод молекулярної динаміки.

Були створені моделі кристалу Ti до та після нанесення плівки графену для граней (0001), (11 $\bar{2}$ 0), (1 $\bar{1}$ 00). Використовуючи створенні моделі була досліджена багат шарова релаксація методом МД з використанням MEAM (Modified Embedded Atom Method) потенціалу за допомогою програмного забезпечення LAMMPS. Для аналізу структур в приповерхневих відрелаксованих шарах були побудовані та проаналізовані: залежність розподілу атомів по глибині, функції радіального розподілу в площинах, та міжплощині відстані. Проведено порівняння міжплощинних відстаней з даними інших джерел. Також були обраховані напруження в системах в цілому та окремо для кожної приповерхневої площини. Дослідження проводились при температурах 300 K і 400 K.

Були зроблені висновки про характер структурних змін та напружень в залежності від щільності пакування площин паралельних поверхні та температури.