

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація: 88 сторінок, 17 рисунків, 13 таблиць, 1 додаток, 67 джерел посилання.

ДИСЛОКАЦІЯ, ДИФУЗІЯ, КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ,
МІЖВУЗЕЛЬНИЙ АТОМ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА

Об'єкт дослідження – чистий метал з об'ємоцентрованою кубічною граткою.

Мета роботи – дослідити взаємодію рухомої дислокації з власним міжвузельним атомом в кристалі з об'ємоцентрованою кубічною граткою за допомогою методу молекулярної динаміки.

Методи дослідження – комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки, структурні дослідження за допомогою програмного забезпечення VMD.

Створено тривимірну молекулярно-динамічну модель, яка дозволяє на атомному рівні досліджувати рух дислокацій та їх взаємодію з точковими дефектами.

На основі отриманої моделі досліджено взаємодію дислокації, що рухається під дією зовнішнього навантження, з власним міжвузельним атомом.

Встановлено, що дислокація є рухомою пасткою для міжвузельних атомів.

Досліджено залежність коефіцієнта самодифузії в залізі від температури та швидкості деформації та встановлено, що при великих швидкостях деформації, вплив температури на процеси масопереносу виражений в значно меншій мірі, ніж вплив швидкості деформації.