

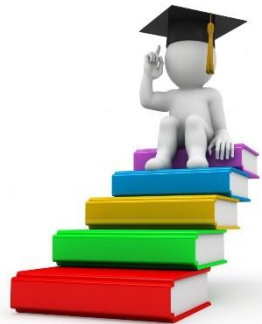
# О себе

---

Подготовил: ст. Давлетебаков А.А.

Проверил: Крылова К.А. ыфвф

# Немного о себе





# Курсовая работа

---

- МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНЫХ РЕШЁТОК МЕДИ С ЛОКАЛЬНЫМИ ДИСКЛИНАЦИЯМИ

# Главное

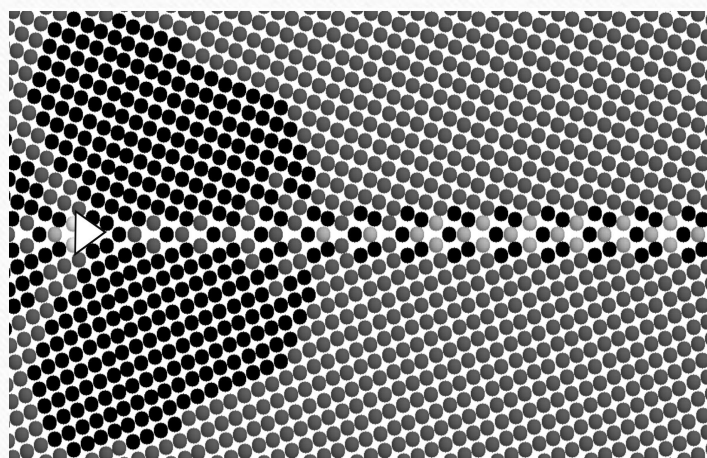
---

- **Цель работы:** является исследование внутренних напряжений создаваемые клиновой дисклинацией в атомных решетках посредством компьютерного моделирования.
- **Задача:** Построение атомных моделей границ зерен с включенными зернограничными дисклинациями.

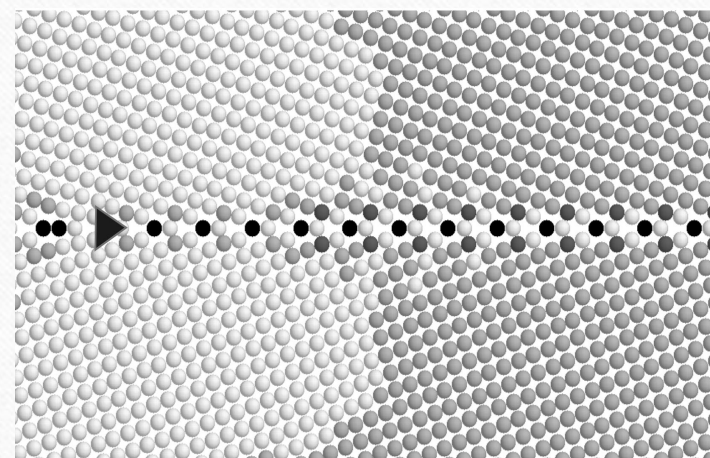
[1] **Дисклинация** - линейный дефект в кристалле, представляющий область упругого искажения кристаллической решетки, связанный с поворотом на определенный угол одной части кристалла относительно другой в ограниченной области и вызывающий изменение взаимного расположения атомов, КЧ и симметрии совершенного кристалла.



# Результат



а)



б)

**Рис.1** Карты гидростатических напряжений, создаваемых клиновой дисклинацией с мощностью а)  $\omega = 4.98^\circ$  и б)  $\omega = 5.21^\circ$

# Заключение

---

В результате выполненной работы методом компьютерного эксперимента было установлено, что внутренние напряжения создаваемые дисклинациями имеют далекодействующий характер. В области ядра дисклинации имеют место высокие, напряжения: растяжения для отрицательной дисклинации и сжатия для положительной дисклинации. Однако разные узлы границы зерен испытывают разные напряжения. Примечательно, что в области высоких упругих напряжений сжатия положительной дисклинации в области граиц зерен наблюдаются напряжение растяжения.



# Чем планирую заниматься

---

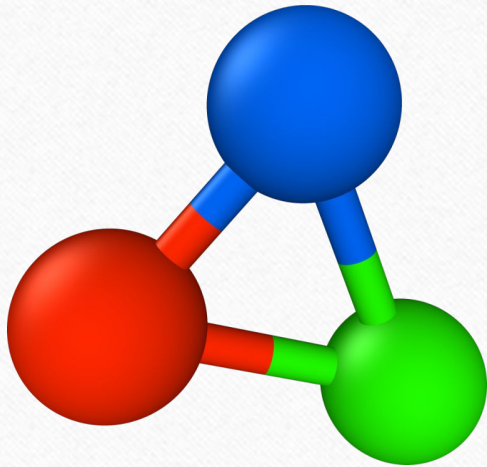


Рис. 2 Программа Ovito



Рис. 3 среда Pycharm

# Пример

---



**Рис. 4** Ударная волна проходит по Al стержень





**- Спасибо за  
внимание! -**