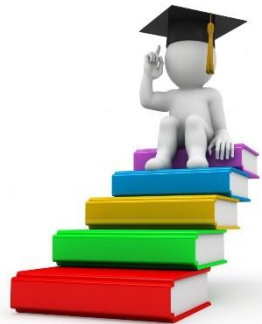


О себе

Подготовил: ст. Давлетебаков А.А.

Проверил: Крылова К.А. [ыфвф](#)

Немного о себе



Курсовая работа

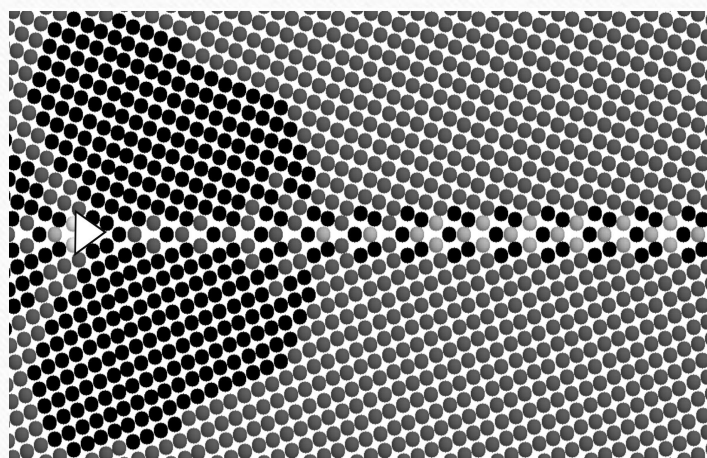
- МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНЫХ РЕШЁТОК МЕДИ С ЛОКАЛЬНЫМИ ДИСКЛИНАЦИЯМИ

Главное

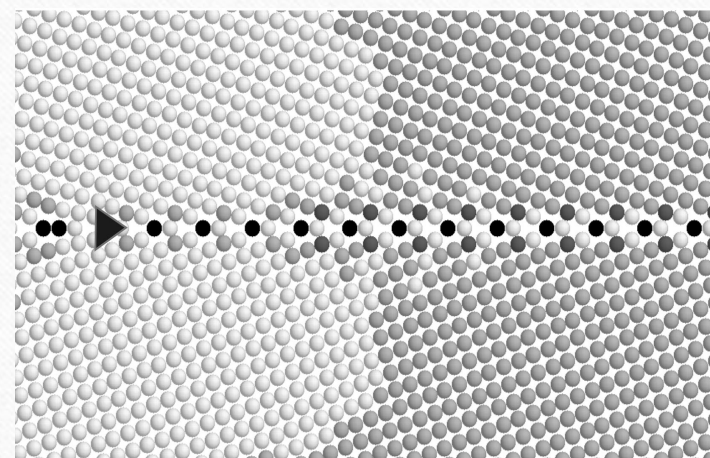
- **Цель работы:** является исследование внутренних напряжений создаваемые клиновой дисклинацией в атомных решетках посредством компьютерного моделирования.
- **Задача:** Построение атомных моделей границ зерен с включенными зернограничными дисклинациями.

[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

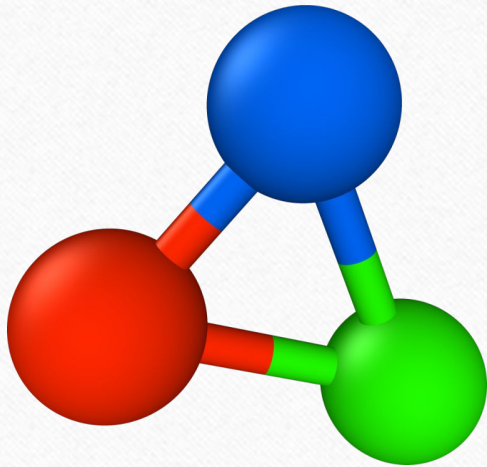


Рис. 2 Программа Ovito



Рис. 3 среда Pycharm

Пример



Рис. 4 Ударная волна проходит по Al стержень



**- Спасибо за
внимание! -**