

УДК 539.215.9

DOI: 10.22213/2410-9304-2019-3-4-48-54

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ПРОЦЕССА РАЗРУШЕНИЯ
НАНОКОМПОЗИТОВ AL/CU*

А. В. Вахрушев, доктор физико-математических наук, профессор, ИжГТУ имени М. Т. Калашникова;
Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

А. Ю. Федотов, кандидат физико-математических наук, доцент, ИжГТУ имени М. Т. Калашникова;
Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

А. Т. Леконцев, ИжГТУ имени М. Т. Калашникова, Ижевск, Россия

Цель данной работы – провести молекулярно-динамическое моделирование одноосного растяжения охлажденного композита Al/Cu. Для проведения расчетов использовался программный комплекс LAMMPS, включающий в себя классический код молекулярной динамики. Для визуализации использовалась программа Ovitо, имеющая большое количество функций, что предоставляет возможность пользователю тщательно исследовать полученные результаты. Для описания межатомного взаимодействия в нанокompозите Al/Cu использовался потенциал погруженного атома EAM. Выбор потенциала обусловлен тем, что он адекватно описывает и воспроизводит свойства широкого класса материалов, в том числе металлов, полупроводников и сплавов. Моделирование осуществлялось в два этапа. На первом образце, состоящий из двух кристаллитов алюминия и меди в форме параллелепипедов, соединенных вдоль одной из сводных границ, размещался в расчетной области и охлаждался при постоянном давлении. Охлаждение осуществлялось для стабилизации наносистемы. На втором этапе, соответствующем деформации, температура и давление менялись в соответствии с протекающими физическими процессами. Для управления температурой и давлением на начальной стадии охлаждения использовался алгоритм термостата и баростата Ноэ – Гувера. В работе продемонстрирован характер распределения продольных напряжений по всему объему кристалла в процессе растяжения. При достижении образцом предела упругости наблюдалось зарождение дефектов кристаллической решетки и распространение их по кристаллу в виде сдвигов и поворотов атомов в кристаллических плоскостях. Определены области зарождения пластических деформаций. Максимальное разрушение материала происходило по границе раздела. С помощью молекулярно-динамического моделирования были динамически исследованы параметры композита Al/Cu (деформация, температура, механическое напряжение). Проведено сопоставление характеристик образца в процессе деформации. В условиях нагружения в материале реализуется множество процессов, включающих в себя зарождение дефектов, упругую и пластическую деформацию, генерацию поврежденных с атомными перестройками.

Ключевые слова: деформация, моделирование, молекулярная динамика, потенциал погруженного атома, дефекты, нанокompозиты, дислокации, механические характеристики.

Введение

Заинтересованность изучения поведения композитных материалов при механическом нагружении имеет комплекс свойств и особенностей, который отличается от традиционных конструкционных материалов. Данными свойствами могут быть высокая прочность или низкая плотность материала. Также возможность изменить физические, химические или механические характеристики при производстве.

В некоторых случаях поверхностное упрочнение материала приводит к снижению прочностных свойств материала [1, 2]. Также поверхности раздела материалов с различными механическими характеристиками являются источниками напряжений и могут стать дополнительными источниками дефектов. Кроме того, представляет интерес вопрос о распределении напряжений и деформации в наноматериалах.

При разработке моделей для описания механизмов, происходящих в материале, свойств и параметров используется компьютерное моделирование для получения приемлемых характеристик композита. При исследовании процессов деформирования или разрушения композиционных материалов уделяется значительное внимание разработке методов диагностики исследуемых данных [3].

В работе [4] методом МД (молекулярной динамики) рассмотрен процесс одноосного растяжения с постоянной скоростью вдоль границы раздела образца, состоящего из кристаллитов алюминия и никеля. При достижении системой предела упругости на границах раздела зарождаются дефекты кристаллической решетки, которые в дальнейшем распространяются по расчетной ячейке.

В работе [5] исследуется влияние микроструктуры материала на его пластическую де-

формацию и его разрушение при высокоскоростном деформировании, имеющем место, например, в ударно волновых явлениях [6]. Изучаются механизмы зарождения и роста дислокационных петель в бездефектном кристалле и при наличии плоскостей при деформациях одноосного сжатия и чистого сдвига. Проведена оценка критических напряжений для зарождения дислокационных петель. Исследование механизмов деформации и разрушения проводилось на примере алюминия с помощью молекулярно-динамического моделирования. Для описания происходящих процессов использовался потенциал погруженного атома (EAM).

При напряжениях сдвига в кристаллической структуре материала возникают такие процессы, как образование дефектов кристаллической решетки, пластическая и упругая деформация, повреждения. Данные явления, которые происходят на атомном масштабе, сложны для экспериментальных исследований. Наибольшая сложность при исследовании описанных процессов возникает непосредственно во время нагрузки. Поэтому требуется дорогостоящее оборудование [7, 8]. Интерес развития методов моделирования, анализа и изучения процессов, происходящих на границе раздела в кристаллических твердых телах, обусловлен описанными сложностями [9–11].

В данной работе методом молекулярной динамики проиллюстрирован процесс одноосного растяжения с постоянной скоростью вдоль границы раздела образца, состоящего из плоских охлажденных кристаллитов (бездефектных монокристаллов) алюминия и меди. Выбор охлажденных наноконпозитов для дальнейшего изучения процессов деформации обусловлен необходимостью дополнительного исследования таких актуальных материалов, как топологические изоляторы. Грани топологических изоляторов проводят электрический ток практически без сопротивления, несмотря на то, что внутренняя часть композита является изолятором [12, 13]. Более ранние исследования были посвящены моделированию механических свойств включений в виде металлических наноструктур сферической формы и наноконпозитов на их основе [14–18].

Математическая модель и постановка задачи

Для проведения моделирования использовался свободный пакет программ для классической молекулярной динамики LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Для визуализации полученных ре-

зультатов использовался программный комплекс Ovito. В качестве потенциала межатомного взаимодействия был выбран хорошо зарекомендовавший себя метод погруженного атома EAM (Embedded Atom Method). В данном потенциале явно учитывается влияние электронной подсистемы на взаимодействие атомов друг с другом в металлах [19, 20]. Электронная плотность ρ_i в некоторой точке r_i , где находится атом i , записывается в виде отдельных электронных плотностей ρ_{ij} , создаваемых другими атомами j :

$$\rho_i = \sum_{j \neq i}^{N_c} \rho_{ij}(r_{ij}), \quad (1)$$

где N_c – количество атомов, заключенных в сфере обрезания с радиусом r_{cut} ; r_{ij} – расстояние между атомами, которое равно $\sqrt{\sum_{\alpha} (x_{i\alpha} - x_{j\alpha})^2}$. После усреднения подразумевается, что электронная плотность ρ_{ij} зависит только от расстояния между атомами r_{ij} . Так как плотность электронов уменьшается при увеличении расстояния от ядра, то для аппроксимации используется следующее выражение:

$$\rho_{ij}(r_{ij}) = \rho_{ij}^0 \exp\left(-\beta \left(\frac{r_{ij}}{r_e} - 1\right)\right), \quad (2)$$

где r_e – равновесное состояние между ближайшими соседними атомами.

Энергия, с которой ионы взаимодействуют с электронной жидкостью, представляется в виде функции $F_i(\rho_i)$, которая зависит от состояния электронной плотности. Ионы притягиваются друг к другу вследствие их взаимодействия с электронной жидкостью, которая находится между ними. Изначально потенциал EAM использовался при описании и моделировании металлов с гранцентрированной кубической решеткой (ГЦК) и объемцентрированной кубической решеткой (ОЦК). Впоследствии данный потенциал был усовершенствован для металлов с гексагональной плотноупакованной решеткой (ГПУ). Недостаток EAM-потенциала заключается в том, что он не учитывает направление химических связей, которые возникают при взаимодействии ядер с π -электронами. Тем не менее в большинстве случаев потенциал дает удовлетворительный результат при воспроизведении различных свойств широкого ряда химических элементов. Потенциальная энергия, дей-

ствующая на определенный атом в ЕАМ, записывается в следующем виде:

$$V_i = F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_c} \varphi(r_{ij}). \quad (3)$$

Отталкивание ионов, происходящее из-за парного кулоновского взаимодействия, характеризуется вторым членом в формуле (3).

Моделирование осуществлялось в два этапа. На первом образец, состоящий из двух кристаллитов алюминия и меди в форме параллелепипедов, соединенных вдоль одной из сводных границ (рис. 1), размещался в расчетной области и охлаждался при постоянном давлении. Охлаждение осуществлялось для стабилизации наносистемы. Выбор охлажденных наноконструкций в качестве дальнейшего объекта изучения обусловлен необходимостью дополнительного исследования таких актуальных материалов, как топологические изоляторы. На втором этапе, соответствующем деформации, температура и давление менялись в соответствии с протекающими физическими процессами.

Для поддержки давления и температуры использовались алгоритмы термостатов и баростатов. Поскольку давление включает в себя кинетическую составляющую из-за скоростей частиц, оба этих алгоритма требуют расчета температуры. Обычно целевая температура и давление указываются пользователем, и термостат и баростат пытаются уравновесить системы с требуемыми температурой и давлением.

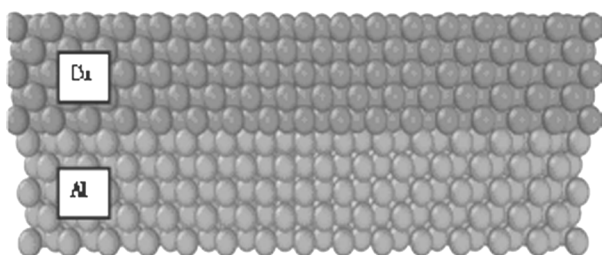


Рис. 1. Изображение образца, состоящее из кристаллитов алюминия и меди

Для проведения расчетов в работе использовался термостат Ноэ – Гувера [21]. В термостате к системе добавляется тепловой резервуар и потери на трение. Сила трения между частицами пропорциональна произведению скорости атома на коэффициент трения ξ . Величина производной ξ по времени определяется через разность между текущей кинетической энергией и значением энергии, соответствующим исходной температуре:

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{f_i}{m_i} - \xi \frac{dr_i}{dt}, \quad i = \overline{1, N},$$

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{Q}(T - T_{ext}), \quad Q = \frac{\tau_T T_{ext}}{4\pi^2}, \quad (4)$$

где Q – коэффициент массы, T_{ext} – установочная температура термостата, T – мгновенная температура системы в текущий момент, τ_T – период осциллятивных колебаний.

На второй стадии после охлаждения вычислялись такие значения параметров кристалла, как степень деформации, внутренняя энергия, ее кинетическая и потенциальная составляющие. Также рассматривалось распределение внутренней энергии, температуры и напряжения по кристаллу в процессе растяжения, в динамике.

Результаты моделирования

Размеры системы по осям x , y и z равнялись 60, 24 и 24 периодов кристаллической решетки соответственно. Граничные условия использовались периодические. Общее количество атомов после формирования наносистемы было приблизительно равно 2200. На начальном этапе происходило охлаждение расчетной области до температуры, близкой к 0 К. В результате охлаждения атомы в наносистеме стабилизировались и занимали позиции, соответствующие минимальной величине энергии. После уравнивания системы кристаллическая структура материалов на границе раздела искажается, происходит обмен атомами в промежуточном слое. Это связано с несоответствием констант кристаллической решетки, вследствие чего образуются дислокации, продемонстрированные на рис. 2.

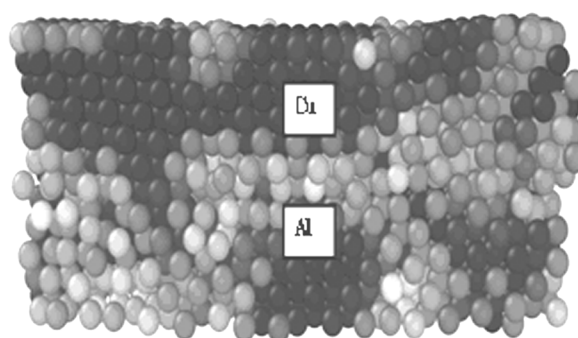


Рис. 2. Изображение образца в процессе уравнивания системы

В процессе одноосного растяжения расчетной ячейки образец сначала деформируется упруго. После достижения материалом предела упругости происходит переход к пластической

деформации, сопровождающейся структурными изменениями. На рис. 3 пластическая деформация соответствует участку графика по оси абсцисс после значения 0,12. При упругой деформации на участке $\varepsilon < \varepsilon_c$ температура образца близка к 0 К, а потенциальная энергия возрастает. При степени деформации $\varepsilon > \varepsilon_c$ температура начинает резко возрастать вследствие зарождения сдвигов в структуре материала, как показано на рис. 4. Наиболее понятным способом определения пластических сдвигов и разрушения материала является построение схемы распределения температуры по кристаллу.

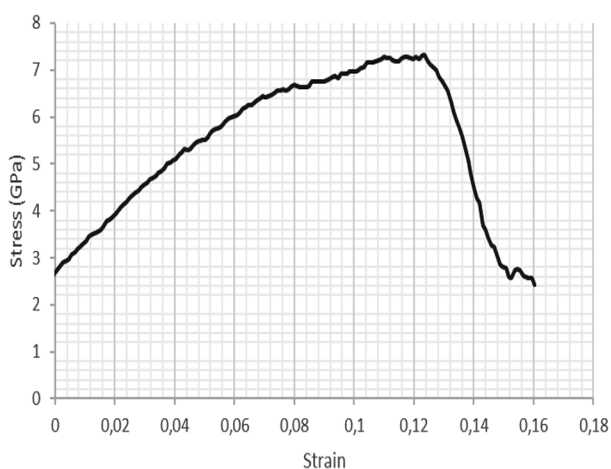


Рис. 3. Кривая механического напряжения в процессе растяжения образца

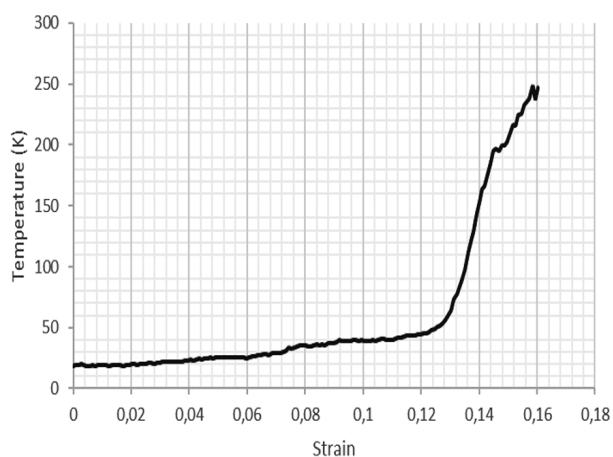


Рис. 4. Зависимость температуры нанокompозита от степени деформации в процессе растяжения

С точки зрения теории упругости задача растяжения описывается уравнениями равновесия

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0 \quad (6)$$

и законом Гука

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = \frac{1}{E} \sigma_{xx} - \frac{\nu}{E} \sigma_{yy}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial y} = -\frac{\nu}{E} \sigma_{xx} + \frac{1}{E} \sigma_{yy}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = \frac{2(1+\nu)}{E} \sigma_{yy}, \quad (9)$$

где E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона.

В процессе деформации кристаллической решетки повреждения распространяются таким образом, что в объеме алюминия имеют место значительные повороты атомов, а в объеме меди (видны волны Людерса – Чернова, которые распространяются по кристаллу). Данные волны распространяются путем сдвигов в плоскостях $\{111\}$, которые наиболее неустойчивы по отношению к сдвигу в ГЦК-металлах в направлении наибольшего касательного напряжения. Пример распределения данных волн показан на рис. 5. Каждый шаг пластической деформации ведет к резким локальным колебаниям энергии и соответственно локальному повышению температуры.

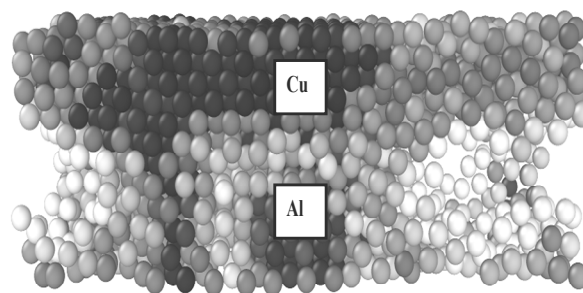


Рис. 5. Расположение дислокаций в момент разрушения слоистого нанокompозита

При исследовании наиболее удобным и эффективным способом определения областей зарождения пластических деформаций является построение графика распределения температуры по образцу в процессе нагружения. Моделирование продемонстрировало, что в областях зарождения дефектов кристаллической решетки температура может превышать среднюю температуру по исследуемому образцу. Исследования

распределения температуры в нанокompозите позволили также определить плоскости скольжения при пластических сдвигах. Таким образом, каждый период необратимой деформации ведет к резкому переходу части кинетической энергии в энергию неупорядоченных процессов и, соответственно, к локальному повышению мгновенной температуры.

Заключение

Моделирование методом молекулярной динамики позволяет рассмотреть, что происходит с материалом на наноуровне при нагружении, исследовать распространение и характер пластической деформации, образование дефектов и разрушений в кристаллической структуре образца. Используемый многочастичный межатомный потенциал ЕАМ продемонстрировал хорошее воспроизведение свойств нанокompозита при исследовании процессов деформации.

Подготовлен алгоритм и скрипт моделирования для задачи деформации нанокompозита в программном комплексе LAMMPS. Алгоритм позволяет динамически контролировать исследуемые характеристики образца, в том числе величины деформации, термодинамические, энергетические и размерные параметры, напряжения, а также в интерактивном режиме наблюдать за процессами зарождения дислокаций и разрушения образца.

Проведено исследование поведения охлажденного нанокompозита Al/Cu при растяжении с постоянной скоростью деформации. Во время нагружения материала происходит образование дефектов кристаллической решетки на границе раздела, которые распространяются по всему образцу. При деформировании композиции Al/Cu определены области зарождения пластической деформации. Максимальное разрушение материала происходит по границе раздела.

Результаты проведенных исследований можно использовать для изучения процессов деформации нанокompозиционных материалов с перспективными функциональными свойствами. Кроме того, охлажденные наноструктурированные объекты активно применяются в качестве топологических изоляторов, которые обладают дифференцированными характеристиками проводимости внутри материала и на его поверхности.

Библиографические ссылки

1. Влияние геометрии и структуры границы раздела на характер развития пластической деформации на мезомасштабном уровне борированных образцов конструкционных сталей / С. В. Панин, А. В. Коваль,

Г. В. Трусова, Ю. И. Почивалов, О. В. Сизова // Физическая мезомеханика. 2000. Т. 3, № 2. С. 99–115.

2. Физическая мезомеханика и молекулярно-динамическое моделирование / И. Ф. Головнев, Е. И. Головнева, А. А. Конев, В. М. Фомин // Физическая мезомеханика. 1998. № 2. С. 21–33.

3. Скворцов Ю. В. Механика композиционных материалов: учеб.-метод. пособие. Самара : СГАУ, 2013. 94 с.

4. Влияние микроструктуры материала на динамическую пластичность и прочность: молекулярно-динамическое моделирование / П. А. Жилиев, А. Ю. Куксин, Г. Э. Норман, С. В. Стариков, В. В. Стегайлов, А. В. Янилкин // Физико-химическая кинетика в газовой механике. 2010. Т. 9, № 1. С. 104–109.

5. Болеста, А. В., Головнев И. Ф., Фомин В. М. Молекулярно-динамическое моделирование квазистатического растяжения композиции Al/Ni вдоль границы раздела // Физическая мезомеханика. 2002. № 4. С. 15–21.

6. Канель Г. И., Фортвов В. Е., Разоренов С. В. Ударные волны в физике конденсированного состояния // УФН. 2007. Т. 177, № 8. С. 809–830.

7. Горячева И. Г. Механика фрикционного взаимодействия. М. : Наука, 2001. 478 с.

8. Панин В. Е., Елсукова Т. Ф., Гриняев Ю. В. Механизм влияния величины зерна на сопротивление деформированию поликристаллов в концепции структурных уровней деформации твердых тел. Часть I. Необходимость учета мезоскопических структурных уровней деформации при анализе уравнения Холла – Петча // Физическая мезомеханика. 2003. Т. 6, № 3. С. 63–74.

9. Persson B.N.J., Bucher F., Chiaia B. Elastic contact between randomly rough surfaces: comparison of theory with numerical results // Phys. Rev. 2002. V. B65, Issue 18. P. 184106.1–7.

10. Iordanoff I., Berthier Y. First steps for a rheological model for the solid third body // Tribology Series. 1999. Vol. 36. Pp. 551–559.

11. Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твердых тел / А. М. Кривцов, И. Б. Волковец, П. В. Ткачев, В. А. Цаплин // Математика, механика и информатика – 2002 : тр. Всерос. конф. 2002. С. 361–377.

12. Веденев С. И. Квантовые осцилляции в трёхмерных топологических изоляторах // Успехи физических наук. 2017. № 187. С. 411–429.

13. Бег Ф., Пужоль П., Рамазашивили Р. Идентификация двумерных антиферромагнитных топологических изоляторов класса Z_2 // ЖЭТФ. 2018. Т. 153, вып. 1. С. 108–126.

14. Vakhrushev A.V., Fedotov A. Y., Shushkov A. A. Calculation of the Elastic Parameters of Composite Materials Based on Nanoparticles Using Multilevel Models // Nanostructures, Nanomaterials, and Nanotechnologies to Nanoindustry. New Jersey: Apple Academic Press, 2014. Chapter 4. P. 51–70.

15. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y., Vakhrushev A. A. Modeling of processes of composite nanoparticle

formation by the molecular dynamics technique. Part 1. Structure of composite nanoparticles // *Nanomechanics Science and Technology. An International Journal*. 2011. Vol. 2, Issue 1. Pp. 9-38.

16. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y., Vakhrushev A. A. Modeling of processes of composite nanoparticle formation by the molecular dynamics technique. Part 2. Probabilistic laws of nanoparticle characteristics // *Nanomechanics Science and Technology. An International Journal*. 2011. Vol. 2, Issue 1. Pp. 39-54.

17. Исследование механизмов формирования наночастиц металлов, определение механических и структурных характеристик нанобъектов и композиционных материалов на их основе / А. В. Вахрушев, А. Ю. Федотов, А. А. Вахрушев, А. А. Шушков, А. В. Шушков // *Химическая физика и мезоскопия*. 2010. Т. 12, № 4. С. 486–495.

18. Вахрушев А. В., Федотов А. Ю. Исследование вероятностных законов распределения структурных характеристик наночастиц, моделируемых методом молекулярной динамики // *Вычислительная механика сплошных сред*. 2009. Т. 2, № 2. С. 14–21.

19. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals // *Physical Review B*. 1984. Vol. 29, Issue 12. Pp. 6443–6453.

20. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. Embedded-atom method function for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Phys. Rev. B*. 1986. Vol. 33, Issue 13. Pp. 7983–7991.

21. Hoover W. Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions // *Physical Review A*. 1985. Vol. 31, Issue 3. Pp. 1695–1697.

References

1. Panin S.V., Koval A.V., Trusova G.V., Pochivalov Yu.I., Sizova O.V. [Influence of the geometry and structure of the interface on the nature of the development of plastic deformation at the mesoscale level of borated structural steel samples]. *Fizicheskaya mezomekhanika*. 2000. Vol. 3, no. 2, pp. 99-115 (in Russ.).

2. Glownev I. F., Golovnev I.F., Golovneva E.I., Konev A.A., Fomin V.M. [Physical mesomechanics and molecular dynamics modeling]. *Fizicheskaya mezomekhanika*. 1998. No. 2. Pp. 21-33.

3. Skvortsov, Yu.V. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov* [Mechanics of composite materials: teaching aid]. Samara, SGAU Publ., 2013, p. 94 (in Russ.).

4. Zhilyaev P.A., Kuksin A.Yu., Norman G.E., Starikov S.V., Stegailov V.V., Yanilkin A.V. [Influence of material microstructure on dynamic plasticity and spall strength: molecular-dynamic simulations]. *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoi mekhanike*. 2010. Vol. 9, no. 1. Pp. 104-109 (in Russ.).

5. Bolesta A.V., Bolesta A.V., Golovnev I.F., Fomin V.M. [Molecular dynamics simulation of quasi-static stretching of the AL / Ni composition along the interface]. *Fizicheskaya mezomekhanika*. 2002. No. 4. Pp. 15-21 (in Russ.).

6. Kanel G.I., Fortov V.E., Ravin S.V. [Shock waves in condensed matter physics]. *UFN*. 2007. Vol. 177, no. 8. Pp. 809-830 (in Russ.).

7. Goryacheva, I.G. *Mekhanika friktsionnogo vzaimodeystviya* [Mechanics of friction interaction]. Moscow, Nauka Publ., 2001. P. 478 (in Russ.).

8. Panin V.E., Elsukova T.F., Grinyaev Yu.V. [The mechanism of grain size influence on strain resistance of polycrystals in the context of structural deformation levels of solids. Part I. Consideration of the mesoscopic structural deformation levels in analyzing the Hall-Petch equation] *Fizicheskaya mezomekhanika*. 2003. Vol. 6, no. 3. Pp. 63-74 (in Russ.).

9. Persson B.N.J., Bucher F., Chiaia B. Elastic contact between randomly rough surfaces: comparison of theory with numerical results. In *Phys. Rev.* 2002. Vol. B65, Issue 18. P. 184106.1–7.

10. Iordanoff I., Berthier Y. First steps for a rheological model for the solid third body. In *Tribology Series*. 1999. Vol. 36. Pp. 551-559.

11. Krivtsov A.M., Volkovets I.B., Tkachev P.V., Tsaplin V.A. *Primenenie metoda dinamiki chastits dlya opisaniya vysokoskorostnogo razrusheniya tverdykh tel* [Application of the particle dynamics method for the description of high-speed destruction of]. *Matematika, mekhanika i informatika – 2002 : tr. Vseros. konf.* [Proc. Works of the All-Russian conference "Mathematics, Mechanics and Informatics 2002"]. 2002, pp. 361-377 (in Russ.).

12. Vedenev S. I. [Quantum oscillations in three-dimensional topological insulators]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 2017. No. 187. Pp. 411-429 (in Russ.).

13. Begue F., Pujol P., Ramazashvili R. [Identification two-dimensional Z_2 antiferromagnetic topological insulators]. *ZhETF*. 2018. Vol. 153, no. 1, pp. 108-126 (in Russ.).

14. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Y., Shushkov A.A. Calculation of the Elastic Parameters of Composite Materials Based on Nanoparticles Using Multilevel Models. In *Nanostructures, Nanomaterials, and Nanotechnologies to Nanoindustry*. New Jersey: Apple Academic Press, 2014. Chapter 4. Pp. 51-70.

15. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Y., Vakhrushev A.A. Modeling of processes of composite nanoparticle formation by the molecular dynamics technique. Part 1. Structure of composite nanoparticles. In *Nanomechanics Science and Technology. An International Journal*. 2011. Vol. 2, Issue 1. Pp. 9-38.

16. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Y., Vakhrushev A.A. Modeling of processes of composite nanoparticle formation by the molecular dynamics technique. Part 2. Probabilistic laws of nanoparticle characteristics. In *Nanomechanics Science and Technology. An International Journal*. 2011. Vol. 2, Issue 1. Pp. 39-54.

17. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Vakhrushev A.A., Shushkov A.A., Shushkov A.V. [Study of process formation of metal nanoparticles, determination of mechanical and structural parameters of nanoobjects and composites with its]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya*. 2010. Vol. 12, no. 4. Pp. 486-495 (in Russ.).

18. Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu. [Investigation of probability distribution laws of structural properties of nanoparticles simulated by molecular dynamics method]. *Vychislitel'naya mekhanika sploshnykh sred.* 2009. Vol. 2, no. 2. Pp. 14-21 (in Russ.).

19. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals. In *Physical Review B*. 1984. Vol. 29, Issue 12. Pp. 6443-6453.

20. Foiles, S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom method function for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. In *Phys. Rev. B*. 1986. Vol. 33, Issue 13. Pp. 7983-7991.

21. Hoover W. Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions. In *Physical Review A*. 1985. Vol. 31, Issue 3. Pp. 1695-1697.

Modeling Of Mechanical Properties And Destruction Process Of Al/Cu Nanocomposites

A. V. Vakhrushev, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Kalashnikov ISTU, Udmurt Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russia

A. Yu. Fedotov, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Kalashnikov ISTU, Udmurt Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russia

A. T. Lektov, Kalashnikov ISTU, Izhevsk, Russia

The purpose of this work is to carry out molecular dynamic simulation of uniaxial tension of the cooled down Al/Cu composition. The software program LAMMPS that includes the classic code of the molecular dynamics was used for calculations. The software program Ovito was used for visualization; it has a great variety of functions, thus allowing the user to investigate the obtained results thoroughly. In order to describe the atomic interaction in Al/Cu nanocomposite, the potential EAM of the submerged atom was used. The choice of the potential is explained by its adequate describing and reproducing the properties of a wide class of materials, including metals, semiconductors and alloys. The simulation was carried out in two stages. At the first stage the sample consisting of two crystallites of aluminum and copper as parallelepipeds connected along one of their joinable boundaries was placed in the design area and cooled down at constant pressure. Cooling down was made for stabilization of the nanosystem. At the second stage that corresponded to deformation, the temperature and pressure were changed in accordance with the current physical processes. In order to control the temperature and pressure at the primary stage of cooling down the algorithm of the Nose-Hoover thermostat and barostat was applied.

The paper presents the character of distribution of longitudinal stresses along the whole volume of the crystal within the tension process. When the specimen reaches the elasticity limit, the emergency of defects of the crystal lattice and their distribution along the crystal as displacements and rotations of atoms in crystalline planes were observed. Areas of emergency of plastic deformations were determined. The maximum material fracture took place along the boundary line. By means of the molecular dynamic simulation the parameters of Al/Cu composition (deformation, temperature, mechanical stress) were dynamically studied. The comparison of the specimen characteristics during deformation was made. Multiple processes take place in the material under loading, which include emergency of defects, elastic and plastic deformations, and generation of damages with atom restructuring.

Keywords: deformation, simulation, molecular dynamics, potential of the submerged atom, defects, nanocomposites, dislocations, mechanical characteristics.

Получено: 28.06.19