

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА  
АТОМНОМ УРОВНЕ.  
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ  
ATOMISTIC SIMULATIONS IN  
NANOCRYSTALLINE METALS.**

Борисова М.З., Яковлева С.П.  
*Институт физико-технических  
проблем Севера СО РАН*

Нанокристаллические металлические материалы обладают рядом уникальных свойств. Повышенные прочностные свойства наряду с сохранением пластичности этих материалов дают им неоспоримое преимущество перед обычными крупнозернистыми материалами. Это обусловлено масштабными эффектами, вызванным малым размером зерна и значительной долей границ зерен. В то время как в поликристаллических материалах, с размером зерна порядка нескольких мкм, пластическая деформация имеет дислокационную природу, в наноматериалах плотность дислокаций в объеме зерна крайне низка и большую роль при деформации играет зернограничная фаза.

Для понимания элементарных актов и механизмов развития пластической деформации в нанокристаллических материалах возможно применение компьютерного моделирования на атомном уровне высокой размерности. Для чистых материалов, для которых известны значения межатомного потенциала, проводится молекулярно-динамическое компьютерное моделирование, рассматривающее структуру на атомном уровне. Образцы разрабатываются с использованием стохастической процедуры, другими словами объем моделируемой ячейки заполняется нанозернами с произвольным расположением и ориентацией, в соответствии с конструкцией Воронова. Образцы содержат от  $6 \cdot 10^6$  атомов, в зависимости от размера зерна (max. 20 нм) и от числа зерен (min. 125 зерен). При моделировании механических свойств наноматериалов согласуются внутривзеренные (дислокационные) и межзеренные (зернограничное проскальзывание) механизмы деформации. При малых размерах зерна дислокации не могут войти в объем зерна из-за больших энергетических затрат, связанных с преодолением сил линейного натяжения. В образцах с размером зерен 12 нм и выше наблюдается аккомодационный механизм деформации: эмиссия и скольжение дислокаций. С увеличением размера зерна происходит смена основного механизма деформации – от зернограничного проскальзывания к дислокационному. Наиболее вероятным механизмом при низких температурах представляется зернограничное проскальзывание. Таким образом, задавая размер зерна и температуру испытания можно рассчитать напряжение те-

чения на определенной стадии процесса деформации. Моделирование на атомном уровне раскрывает связи структурных особенностей материалов с их механическими свойствами, позволяет предсказать и объяснить экспериментальные данные и дает новую почву для развития теоретических знаний о материи.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООБМЕНА  
МИКРОЧАСТИЦЫ С  
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ГАЗОВОЙ  
СРЕДОЙ**

Бородин В.И., Трухачева В.А.  
*Петрозаводский государственный университет*

Газодисперсные смеси широко используются как в обычных термических, так и плазменных технологиях, и расчет процессов теплообмена между частицами вводимого вещества и газовой фазой является необходимым этапом при разработке данных технологий. Однако, в литературе, в основном, обсуждаются вопросы, непосредственно связанные с нагревом частиц в Ньютоновском приближении теплообмена с использованием коэффициента теплоотдачи и не рассматриваются процессы изменения свойств среды (возмущение), окружающей частицу [1]. Однако, в ряде случаев, при рассмотрении тепло-, массо- и зарядообменных явлений в газодисперсной среде такая информация необходима.

В настоящей работе приводятся результаты расчетов изменения температурного поля вокруг частиц разного диаметра, помещенных в высокотемпературную среду аргона. При расчетах не учитывается движение частиц относительно плазмы. Данная ситуация имеет место в системах без потоков, а также в струях газа с мелкими частицами (диаметрами порядка или меньше 10 мкм для атмосферного давления), когда они за счет аэродинамической силы разгоняются практически до скорости струи.

При расчетах учитывались только кондуктивные тепловые потоки на частицу, что соответствует реальным тепловым потокам для среды с не слишком высокой температурой (например, для аргона порядка 7000 К), которые часто реализуются в плазмохимических процессах при косвенном нагреве от внешних генераторов плазмы. Не учитывались также заряженные частицы, роль которых в теплообмене при данных условиях мала [1]. Для выделения влияния чисто кондуктивного механизма теплообмена при расчетах частица считалась неиспаряющейся.

Расчеты проводились с использованием двух моделей для теплообмена: модель сплошной среды (континуальная модель) и непрерывно-дискретная модель, суть которой следующая.