Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Институт прикладной математики и механики

Кафедра теоретической механики

Отчет по научной работе

Тема: «Динамика дислокаций и ударно волновое поведение»

Выполнила студентка гр. 53604/1

Буковская К. С.

Санкт-Петербург 2014

**Цели:**

* Исследовать динамику дислокаций и ударно-волновое поведение среды с графеновыми включениями.
* Исследовать влияние дислокаций на упрочнение материала, в частность на железо с графеновым нанокомпозитом.
* Научиться работать с пакетом LAAMPS.

**Процесс исполнения целей:**

* Институт IMWF является одним из ведущих в Германии из занимающихся упрочнением металлических нанокомпозитов и изучает влияния наноразмерных графеновых дисков, встроенных в матрицу железа на механические свойства.IMWF пригласил нас к сотрудничеству в рамках развития проекта „Механизмы упрочнения кристаллов железа с помощью графена “. Кафедра теоретической механики ИПММ, в свою очередь, уделяет большое внимание изучению графена, в частности упругих свойств его кристаллической решетки.
* В сферу моих интересов будет входить изучение влияния наноразмерных графеновых дисков, встроенных в матрицу железа и твёрдый раствор железо-углероды твёрдый раствор железо-углерод, на механические свойства и углерода в твердом растворе. Данное исследование будет проводится численным моделированием с помощью молекулярной динамики. Особый интерес представляют свойства эластичности, прочности и пластичности Молекулярно-динамическое моделированиe моно- и поликристаллов осуществляется при различных температурах, углерод- и графеновыеh - концентрациях, а также для различных размеров, расстояний и ориентации графеновых дисков .
* Целями моделирования являются фундаментальные выводы, касающиеся дислокации / осаждение взаимодействия, остаточных напряжений в кристаллической решетке, вызванных графеновыми дисками или примесью атома углерода, нанотрещины и изменения механических свойств. Впервые с помощью молекулярной динамики будет исследован процесс упрочнения моно- и поликристаллов железа с помощью графеновых дисков. Так же будет исследовано влияние графена на зону пластичности при разрушении твёрдого раствора железа-углерод.
* На мой взгляд, данная стажировка может внести весомый вклад в рассширение международных связей нашего университета с мировыми институтами, она откроет новые возможности для обмена опытом и знаниями Я верю, что полученная мной возможность прохождения стажировки в Институте испытания материалов, материаловедения и сопротивления материалов Штутгартского университета будет содействовать развитию исследований такого перспективного материла, как графен. Я готова принимать непосредственное участие во всех этапах работы: разработке и планировании исследований, построении алгоритмов, написании программ, тестировании и проверке, интерпретации полученных данных, формулировании выводов и написании отчетов по проектам. В перспективе я бы хотела отразить полученный опыт в публикациях и выступлениях с докладами на конференциях и семинарах.

В программе LAMMPS было смоделирован экземпляр железа, железа с графеновым включение разной концентрации.Написан ряд тестовых программ , а так же получены графики зависимости напряжения от деформации.

 Совместно с Ю.И.Мещеряковым преступили к изучению темы «Динамика дислокаций и ударно-волновое поведение среды с графеновыми включениями» ,но к сожалению пока что изучается только теоритический материал по статье J.Lipkin, J.R. Asay "Reshock and Release of Shock-Compressed 6061-T6 Aluminum".  Journal of Applied Physics. Vol. 48, pp. 182-189 (1977).

**Литература:**

1. J.Lipkin, J.R. Asay "Reshock and Release of Shock-Compressed 6061-T6 Aluminum".  Journal of Applied Physics. Vol. 48, pp. 182-189 (1977).
2. Optimized Tersoff and Brenner empirical potential parameters for lattice dynamics and phonon thermal transport in carbon nanotubes and grapheme.L. Lindsay
3. Strengthening effect of single-atomic-layer graphene in metal–graphene nanolayered composites.Youbin Kim1, Jinsup Lee, Min Sun Yeom, Jae Won Shin, Hyungjun Kim
4. The Fabrication, Properties, and Uses of Graphene/Polymer Composites .Jinhong Du, Hui-Ming Cheng \*