Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Институт прикладной математики и механики

Кафедра теоретической механики

**ОТЧЁТ ПО НИР**

Выполнил студент гр. 53604/1

Гладков И. О.

Науч. рук.

Панченко А.Ю.

Санкт-Петербург 2014

**ЗАДАЧИ**

* Овладеть навыками работы с математическим пакетом для моделирования динамики частиц LAAMPS.
* Реализовать тестовое задание: одноосное растяжение железной пластинки и такой же пластинки со слоем графена.
* Рассмотреть поведение пластинок из железа, меди, алюминия с разными концентрациями графена в упругой области при различных режимах нагружения. Найти пределы пластичности.
* Изучить влияние наличия дислокаций на деформацию пластинок.

**СОСТОЯНИЕ РАБОТЫ**

* Работа реализуется развития проекта “Механизмы упрочнения кристаллов железа с помощью графена,” совместно с IMWF.
* Изучение влияния наноразмерных графеновых дисков, встроенных в матрицы железа, меди, алюминия и сплавов на их основе на механические свойства. Численное моделирование методом динамики частиц. Молекулярно-динамическое моделирование моно- и поликристаллов осуществляется при различных температурах и концентрациях примеси, а также для различных размеров, и ориентаций графеновых дисков.
* Целями моделирования являются фундаментальные выводы, касающиеся влияния внедрения пластин графена на скольжение дислокации. 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.

При помощи пакета LAMMPS был смоделирован экземпляр железа, железа с графеновым включение разной концентрации. Написан ряд тестовых программ, а также получены графики зависимости напряжения от деформации.

**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 \*