

## ПОВЕДЕНИЕ ТРОЙНЫХ ТОЧЕК ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ПРОЦЕССЕ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ГЦК МЕТАЛЛАХ

<sup>1</sup>Фомин Е.В., <sup>1,2</sup>Майер А.Е.

<sup>1</sup>Челябинский Государственный Университет, Челябинск

<sup>2</sup>Южно-Уральский Государственный Университет, Челябинск

В работе исследуется зарождение дислокаций и двойников с тройных точек границ зерен в кристаллах ГЦК алюминия, меди и никеля. Исследование проводится с помощью метода классической молекулярной динамики [1]. Для этого рассматривается следующая модель кристалла - поликристалл размером  $60 \times 13 \times 46$  нм<sup>3</sup> содержащий три зерна и тройную точку между ними [2]. Зарождение дислокаций и двойников происходит под действием сдвиговой деформации: верхний и нижний слои поликристалла толщиной 3 нм сдвигаются с постоянной скоростью, рассматривались скорости сдвига 2 и 5 м/с. Температура системы в процессе деформации поддерживается при постоянном значении с помощью термостата Нозе-Гувера, рассматривались температуры 300 и 500 К. Периодические граничные условия вдоль осей X, Y используются для устранения граничных эффектов во время моделирования. Визуализация и анализ атомных структур выполняются с помощью пакета OVITO [3].

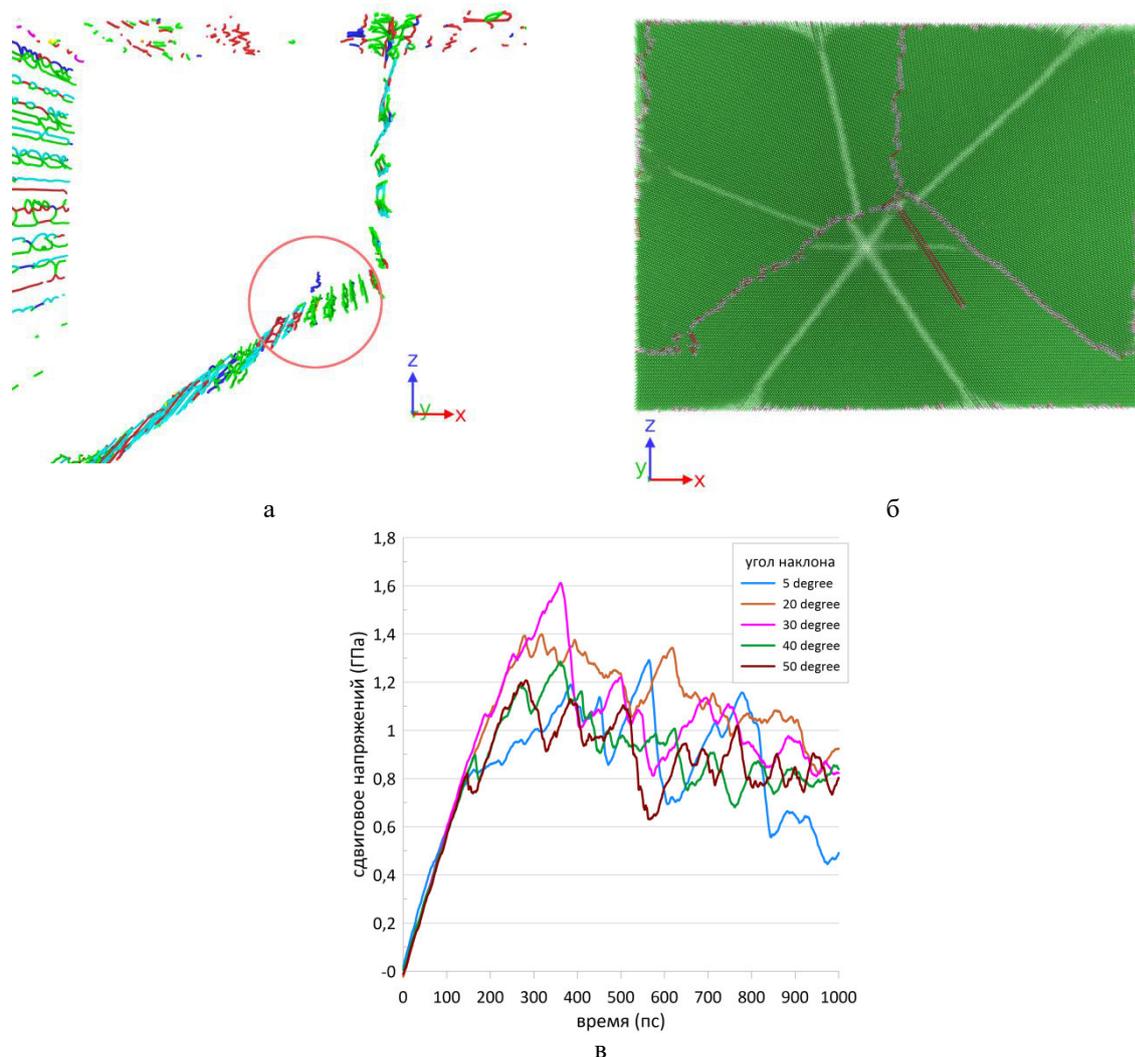


Рис. 1. Результаты молекулярно-динамического моделирования сдвиговой деформации поликристалла алюминия с тройной точкой границ зерен: зарождение дислокации из тройной точки (а); зарождение двойника из тройной точки (б); напряженное состояние систем с различной конфигурацией границ зерен при сдвиговой деформации (в), рассматриваются симметричные границы зерен наклона и поворота и система с тройной точкой границ зерен наклона

Аппроксимация сложных зависимостей методами машинного обучения на основе данных молекулярно-динамического моделирования деформации металлов показывает хорошие результаты, что представлено в недавних работах [4, 5]. В данной работе на основе данных молекулярно-динамического моделирования сдвиговой деформации поликристаллов с тройными точками составлен набор данных для обучения, тестирования и валидации искусственной нейронной сети (ИНС). ИНС прогнозирует момент зарождения дислокации и двойников с тройной точки границ зерен в зависимости от угла разориентировки двух симметрично наклоненных зерен и значения критического напряжения в системе.

*Работа поддержана Минобрнауки РФ (гос. задание НИР ЧелГУ № 075-01391-22-00) и грантом РФФИ (проект № 20-11-20153) в части развития нейронных сетей для описания эмиссии дислокаций.*

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. P. 1–19.
2. Hirel P. AtomsK: a tool for manipulating and converting atomic data files // Comput. Phys. Commun. 2015. V. 197. P. 212–219.
3. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. V. 18. P. 015012.
4. Mayer A.E., Lekanov M.V., Grachyova N.A., Fomin E.V. Machine-Learning-Based Model of Elastic—Plastic Deformation of Copper for Application to Shock Wave Problem // Metals. 2022. V. 12. P. 402.
5. Latypov F.T., Fomin E.V., Krasnikov V.S., Mayer A.E. Dynamic compaction of aluminum with nanopores of varied shape: MD simulations and machine-learning-based approximation of deformation behavior // Int. J. Plast. 2022. V. 156. P. 103363.