

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ  
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

**Інститут матеріалознавства та зварювання ім. Є. О. Патона  
Кафедра високотемпературних матеріалів та порошкової металургії**

До захисту допущено:

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ Юрій БОГОМОЛ

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2021 р.

**Дипломна робота**

**На здобуття ступеня бакалавра**

**За освітньо-професійною програмою**

**«Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів»**

**спеціальності 132 «Матеріалознавство»**

**на тему: «Молекулярно-динамічне моделювання впливу кристалографічної  
орієнтації на величину масштабного ефекту для міцності вольфрамових  
нанодротів»**

Виконав:

студент IV курсу, групи ФН-71

Савєга Віталій Юрійович \_\_\_\_\_

Керівник:

Професор, д. ф.-м. н., професор,

Котречко Сергій Олексійович \_\_\_\_\_

Консультант з розділу охорони праці:

Професор, д. т. н., професор,

Левченко Олег Григорович \_\_\_\_\_

Консультант з економічно-організаційного розділу:

Доцент, к. е. н., доцент,

Нараєвський Сергій Вікторович \_\_\_\_\_

Нормоконтроль:

Доцент, к. т. н., доцент,

Бірюкович Ліна Олегівна \_\_\_\_\_

Рецензент:

Зав. відд, д.ф.-м.н., с.н.с.,

Філатов Олександр Валентинович \_\_\_\_\_

Засвідчую, що у цьому дипломному проекті немає  
запозичень з праць інших авторів без відповідних  
посилань.

Студент \_\_\_\_\_

Київ – 2021 року

**Національний технічний університет України**  
**«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**  
**Інститут матеріалознавства та зварювання ім. Є. О. Патона**  
**Кафедра Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії**

Рівень вищої освіти – перший (бакалаврський)

Спеціальність – 132 «Матеріалознавство»

Освітньо-професійна програма «Нанотехнології та комп'ютерний дизайн матеріалів»

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ Юрій БОГОМОЛ

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2021 р.

**ЗАВДАННЯ**

**на дипломну роботу студенту**

**Савезі Віталію Юрійовичу**

1. Тема роботи «Молекулярно-динамічне моделювання впливу кристалографічної орієнтації на величину масштабного ефекту для міцності вольфрамових нанодротів», керівник роботи Котречко С.О., доктор технічних наук, Професор, затверджені наказом по університету від «27» травня 2021 р. №1358-с
2. Термін подання студентом роботи 17 червня 2021р.
3. Вихідні дані до роботи: аналіз літературних джерел, результати досліджень

4. Зміст роботи: літературний огляд, матеріали та методи дослідження, результати дослідження та їх обговорення, організаційно-економічний розділ, охорона праці.

5. Перелік ілюстративного матеріалу (із зазначенням плакатів, презентацій тощо): Презентація

6. Консультанти розділів роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Організаційно-економічна частина	Нараєвський С. В. доцент	20.05.2021	
Охорона праці	Левченко О.Г. зав. каф., професор	20.05.2021	

7. Дата видачі завдання 12.04.2021 р.

#### Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання дипломної роботи	Термін виконання етапів роботи	Примітка
1.	Літературний огляд	14.05	
2.	Моделювання та аналіз отриманих результатів	22.05	
3.	Написання тексту роботи	01.06	
4.	Підготовка презентації	08.06	
5.	Оформлення роботи	11.06	
6.	Захист дипломної роботи	17.06	

Студент

Керівник

Віталій САВЕГА

Сергій КОТРЕЧКО

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 68 с., 7 табл., 26 рис., 34 джерела.

ВОЛЬФРАМ, ДЕФОРМАЦІЯ, КРИСТАЛОГРАФІЧНА ОРІЄНТАЦІЯ,  
МОДЕЛЮВАННЯ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА.

Об'єкт дослідження: нанодропи W з кристалографічною орієнтацією [100], [110], [111].

Предмет дослідження: особливості розмірного ефекту у металів з ОЦК-ґраткою.

Мета роботи: Дослідити вплив кристалографічної орієнтації на залежність міцності вольфрамового нанодроту від його діаметра.

Молекулярно-динамічне моделювання проводилось для вольфрамових нанодротів з діаметрами від 0,5 нм до 5 нм. Моделювався розтяг нанодротів в трьох кристалографічних напрямках [100], [110] та [111] при температурах 77 К і 300 К.

Встановлено, що при деформації розтягом в кристалографічних напрямках [110] та [111] спостерігається аномальний масштабний ефект, який проявляється у зменшенні міцності при зменшенні діаметра нанодроту. Встановлений ефект аналізується в рамках моделі переходу від пружних до пластичних деформацій в металевих нанодротах з ОЦК ґраткою.

В рамках цієї моделі показано, що причиною цього ефекту є вплив сил поверхневого натягу на величину критичного утворення нерівноважних дислокацій в приповерхневих шарах нанодроту.

## ABSTRACT

Research report: 68 pp., 7 tables., 26 fig., 34 sources.

MOLECULAR DYNAMICS, TUNGSTEN, MODELING, DEFORMATION, CRYSTALLOGRAPHIC ORIENTATION.

Object of research: nanowires W with crystallographic orientation [100], [110], [111].

Subject of research: features of dimensional effect in metals with BCC lattice.

Purpose: To investigate the influence of crystallographic orientation on the dependence of the strength of tungsten nanowire on its diameter.

Molecular dynamic modeling was performed for tungsten nanowires with diameters from 0.5 to 5 *nm*. The stretching of nanowires in three crystallographic directions [100], [110] and [111] at temperatures of 77 and 300 *K* was simulated.

It is established that during tensile deformation in the crystallographic directions [110] and [111] an anomalous scale effect is observed, which is manifested in a decrease in strength with a decrease in the nanowire diameter. The established effect is analyzed within the framework of the model of transition from elastic to plastic deformations in metal nanowires with BCC lattice.

In the framework of this model, it is shown that the reason for this effect is the influence of surface tension forces on the magnitude of the critical formation of nonequilibrium dislocations in the near-surface layers of the nanowire.

## ЗМІСТ

ВСТУП .....	8
1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД .....	9
1.1 Огляд існуючих технологій отримання нанозразків та методів їх випробовувань на стиск та розтяг .....	9
1.1.1 Наностовпчики .....	9
1.1.2 Наноголки .....	14
1.2 Аналіз методів комп'ютерного моделювання одновісної деформації розтягом та стиском нанодротів металів з ОЦК ґраткою .....	21
1.3 Модель розмірного ефекту .....	27
2 МАТЕРІАЛИ І МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ .....	32
2.1 Загальний опис моделі .....	32
2.2 Метод молекулярної динаміки .....	32
2.3 Вибір програмного забезпечення .....	33
2.4 Параметри термостата .....	34
2.5 Розрахунок механічних напружень .....	35
2.6 Метод зануреного атома .....	35
2.7 Потенціал для $W$ .....	36
2.8 Початкові і граничні умови .....	38
2.10 Характеристика форми поперечного перерізу і довжини нанозразків .....	39
3 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ .....	41
3.1 Результати комп'ютерного моделювання впливу кристалографічної орієнтації на міцність вольфрамівих нанодротів .....	41
3.2 Модель впливу діаметра нанодроту на його міцність .....	42
3.3 Порівняння теоретичної залежності міцності нанодроту від його діаметра з результатами МД-моделювання .....	43
4 РОЗДІЛ ОХОРОНИ ПРАЦІ .....	45
4.1 Правові та організаційні основи охорони праці під час роботи за комп'ютером .....	45
4.2 Аналіз параметрів приміщення .....	45
4.3 Виробниче освітлення на робочих місцях користувачів ВДТ .....	46
4.4 Санітарно-гігієнічні вимоги до умов праці на комп'ютеризованих робочих місцях .....	47

4.5 Розміщення устаткування та організації робочих місць користувачів ВДТ .....	48
4.6 Організація режиму праці та відпочинку користувачів ВДТ.....	49
5 ОРГАНІЗАЦІЙНО-ЕКОНОМІЧНИЙ РОЗДІЛ .....	51
5.1 Науково-технічна актуальність теми дослідження .....	51
5.2 Розрахунок витрат на проведення НДР .....	51
5.2.1 Витрати на оплату праці .....	52
5.2.2 Єдиний соціальний внесок .....	53
5.2.3 Матеріали, необхідні для проведення досліджень.....	54
5.2.4 Енергоносії для проведення досліджень .....	54
5.2.5 Витрати на спеціальне обладнання.....	54
5.2.6. Вартість послуг сторонніх організацій.....	54
5.2.7 Витрати на службові відрядження .....	54
5.2.8 Інші прямі невраховані витрати .....	55
5.2.9 Накладні витрати .....	55
5.2.10 Розроблення планової калькуляції кошторисної вартості теми	56
5.3 Науково-технічна ефективність НДР.....	57
ВИСНОВКИ.....	61
CONCLUSIONS .....	62
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ.....	63

## ВСТУП

Сучасні нанотехнології дозволяють отримувати нанорозмірні об'єкти, які не містять дислокацій. У зв'язку з чим виникає питання який механізм переходу від пружних до пластичних деформацій в нанорозмірних кристалах і, відповідно, в чому полягає фізична природа масштабного ефекту в цих об'єктах.

На сьогодні матеріали з W є не тільки одними з найміцніших, а й широко використовуються у нанотехнологіях, вони використовуються як контилівери у атомних-силових мікроскопах, джерела іонів в вакуумній електроніці та іншому. Тому вольфрам є перспективним у дослідженнях в нано розмірі.

Метод молекулярної динаміки є єдиним інструментом який дозволяє отримати кількісну інформацію про міцність, руйнування, деформації відносно звичайного експерименту який дає лише обмежену інформацію. Кількісна інформація здатна дати нам набагато більше важливої інформації, яку просто неможливо визначити під час експерименту.

# 1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

## 1.1 Огляд існуючих технологій отримання нанозразків та методів їх випробовувань на стиск та розтяг

### 1.1.1 Наностовпчики

Наностовпчики (рис 1.1) являють собою наноструктури в формі стовпчиків діаметром приблизно 10 нанометрів, які можна згрупувати у вигляді решіток. Вони являють собою тип метаматеріалу, а це означає, що наностовпчики отримують свої атрибути через те, що вони згруповані в штучно створені структури, а не за свої природні властивості. Наностовпчики відрізняються від інших наноструктур своєю унікальною формою. Кожен наностовпчик має форму стовпа внизу і звужується у загострений кінець вгорі. Ця форма в поєднанні з можливістю групування наностовпчиків демонструє безліч корисних властивостей. Наностовпчики мають безліч застосувань, в тому числі ефективні сонячні панелі, аналіз високої роздільної здатності та антибактеріальні поверхні.

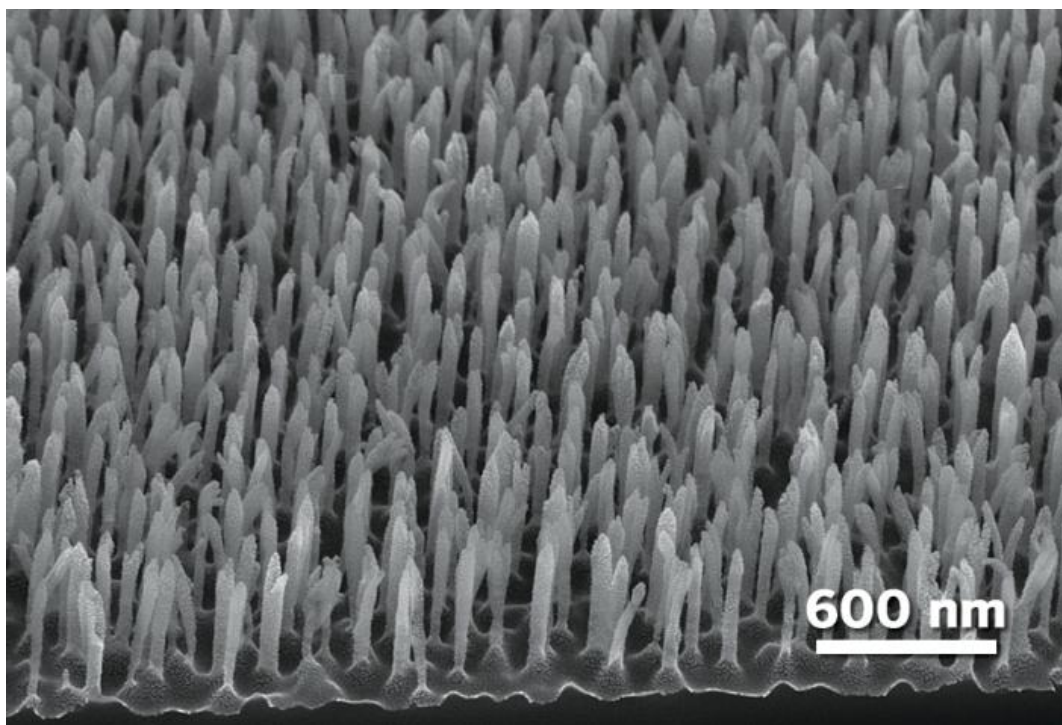
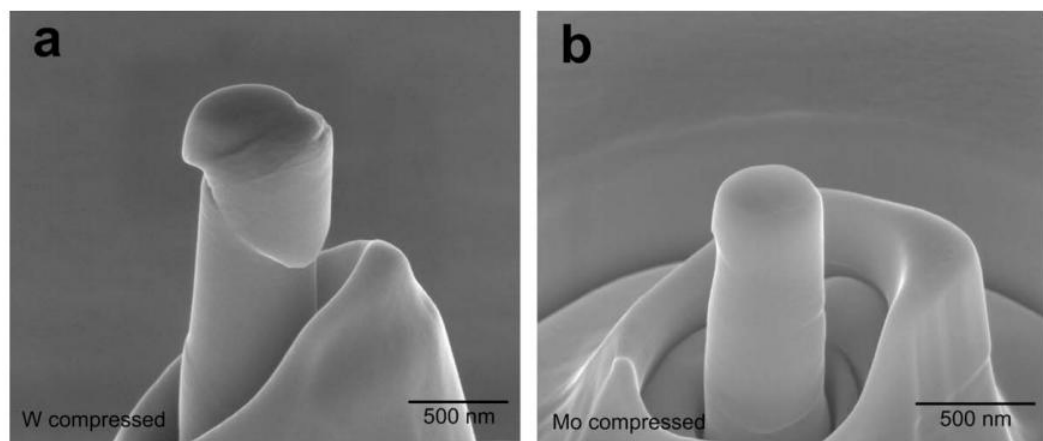


Рисунок 1.1 – Зображення наностовпчиків

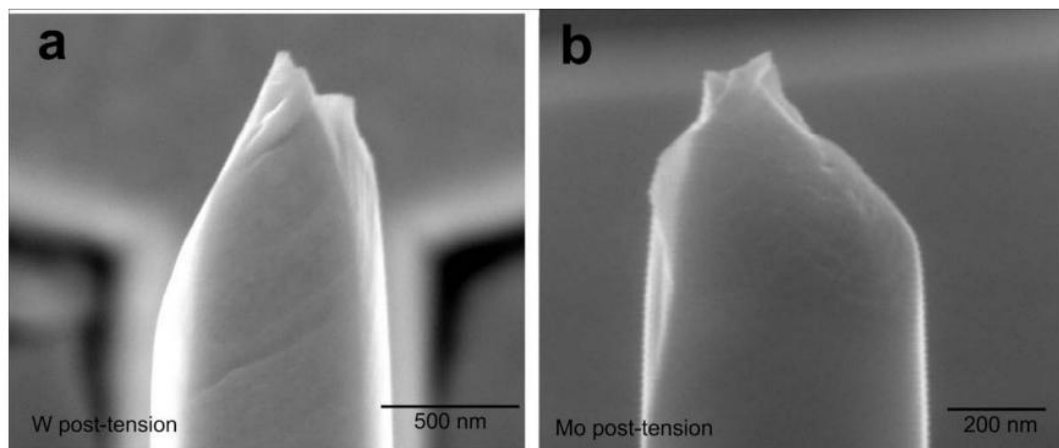
На сьогоднішній день є два найбільш ефективних методи отримання наностовпчиків, сфокусований іонний пучок (FIB) і травлення.

Сфокусована Іонно-променева літографія – технологія виготовлення електронних мікросхем, що використовує літографічний процес з експонуванням (опроміненням) резисту іонними пучками нанометрового перетину.



a– W, b – Mo

Рисунок 1.2 – SEM зображення стиснутих наностовпчиків [1]

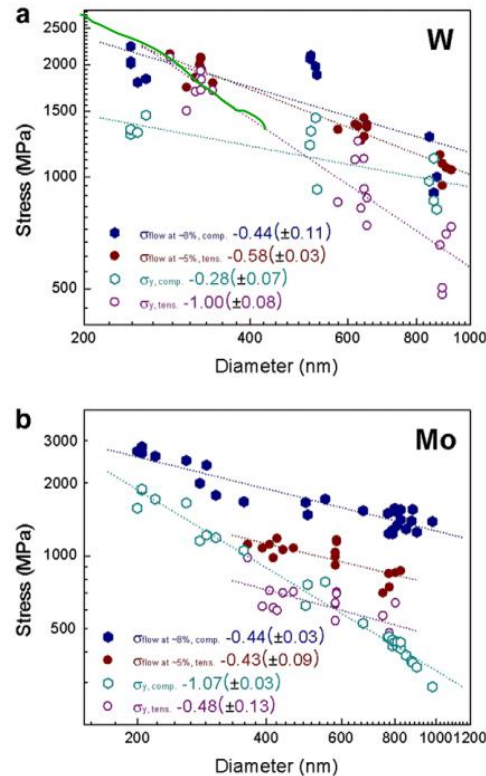


a– W, b – Mo

Рисунок 1.3 – Зображення на зразках за допомогою SEM після натягу [1]

Особливість FIB технології полягає в тому, що при виготовленні наностовпчиків в приповерхневих шарах утворюються дефекти, як точкові, так і

лінійні (дислокації). Наявність останніх спричинює те, що міцність наностовпчиків складає 1~3ГПа, що набагато менше теоретичної 20~30 ГПа, Крім того, наявність дислокацій в приповерхневих шарах приводить до залежності міцності від діаметра та є причиною значного розкиду величини міцності.



a – W, b – Mo

Рисунок 1.4 – Напруження потоку при 8% деформації при стисненні та при 5% деформації при розтягуванні і 0,2% зміщення межі текучості проти розміру зразка [1]

Процес виготовлення наностовпчиків шляхом травлення починається з елементарних складових (Ni, Al та Mo, всі > 99,99% чистоти), евтектичні сплави, що мають склад Ni – 45,5Al – 9Mo (%) Розплавляється дугою і наливається в циліндричні мідні форми розміром 10 мм в діаметрі і довжиною 100 мм. Литі сплави спрямовано затвердівають у високотемпературній оптичній плаваючій зоні печі в проточному газі аргону для отримання добре вирівняного волокнистого композиту, що складаються з [100] орієнтованого Мо-

сплаву волокон із вкладеними приблизно квадратними перерізами в матриці NiAl. Хоча волокна в евтектичному композиті насправді є твердими розчинами Mo (86Mo – 10Al – 4Ni, %), Позначаються вони просто як «Mo волокна» або «Mo стовпи». Крім того, коли мається на увазі розмір Mo волокон або стовпців то ми мається на увазі довжина ребра ( $a$ ) їх квадратних перетинів. Цей розмір був отриманий шляхом вимірювання площі перерізу ( $A$ ) волокон за допомогою аналізу зображень програмного забезпечення та припускаючи, що  $a = \sqrt{A}$ . Стверділі за напрямком композити розрізаються поперечно на диски товщиною 2 мм (тобто, перпендикулярно до напрямку росту) за допомогою електророзрядної обробки. Деякі диски були попередньо напружені при кімнатній температурі шляхом стиснення, нормального до їх осей (тобто паралельно осям волокон). Кількість накладеного технічного попереднього напруження (відсоток зменшення товщини) становив від 0% до 11%. Вирощені та попередньо напружені диски монтується в епоксидній смолі та шліфується / поліруються із застосуванням стандартної металографічної процедури. Остаточний етап полірування проводиться в автоматичній вібраційній полірувальній машина з колоїдним діоксидом кремнію як полірувальне середовище. Відшліфовані зразки травили у розчині 74%  $H_2O$ , 18% HCl та 8%  $H_2O_2$  до видалення матриці NiAl, в матриці виставляють волокна як окремо стоячі стовпи Mo. Матриця витравлювалась зі швидкістю приблизно  $1 \mu\text{m хв}^{-1}$ , що дозволило нам контролювати аспект співвідношення стовпів Mo у межах 2,5–3,0. Протравлені зразки досліджують в скануючому електронному мікроскоп (SEM) для визначення якості стовпів і вимірюють їх розмірів.

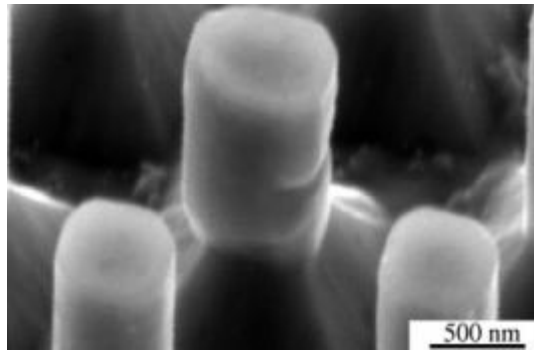
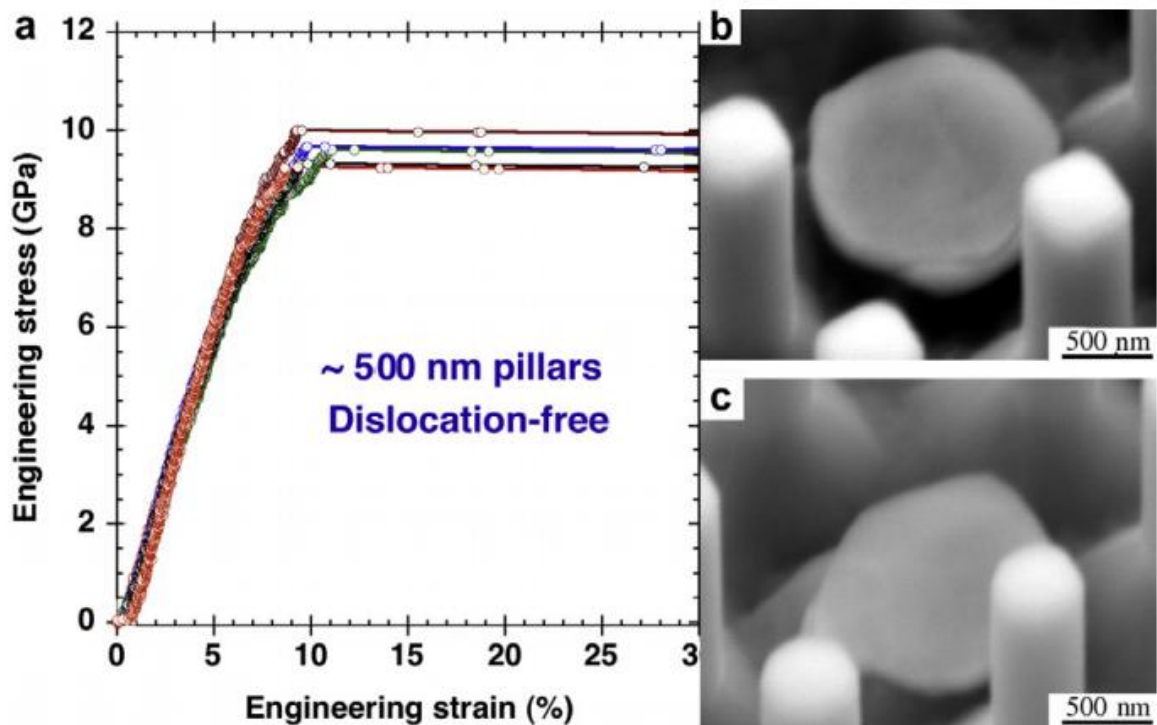


Рисунок 1.5 – Матриця з наностовпчиками після травлення [2]

Після травлення ми отримуємо наностовпчики практично без дефектів, що дозволяє отримувати міцність наближену до теоретичної (10 ГПа, рис. 1.6), відсутність масштабного ефекту і практично немає розкиду (рис. 1.7).



а – інженерні криві напруги-деформації; б, с – СЕМ-зображення стовпчиків після випробувань на стиск, що показують катастрофічний зсув

Рисунок 1.6 – Результати випробувань на стиск стовпів Мо 500 нм у вирощеному стані [2]

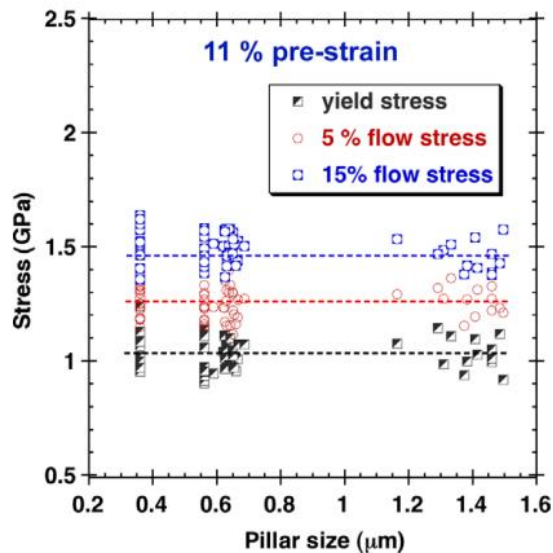


Рисунок 1.7. – Залежність напруження текучості при залишкових деформаціях 0,2% та 5% та 15% від розміру стовпчика для Мо з урахуванням попередньої деформації 11% [2]

Наностовпчики виготовлені таким методом є найбільш наближеними до ідеальних кристалів.

### 1.1.2 Наноголки

Наноголки отримують методом електрохімічного травлення та подальшого випаровування в електричному полі (високопольовий метод).

В нашому огляді було розглянуто наноголки Мо, що мають початковий радіус кривизни на кінчику в діапазоні 8–20 нм, готували електрохімічним травленням 99,998% чистого молібденового дроту в розчині 1 N КОН. Дріт попередньо відпалювали при 500 °C протягом 5 хв у вакуумі  $10^{-6}$  Па і мали щільність дислокації  $10^9 \text{ см}^{-2}$ . Кут звуження зразків знаходився в межах 2–10°. Топографію наконечника до і після руйнування досліджували за допомогою просвічуючого електронного мікроскопа EM-400 (ТЕМ) при прискорювальній напрузі 120 кВ.

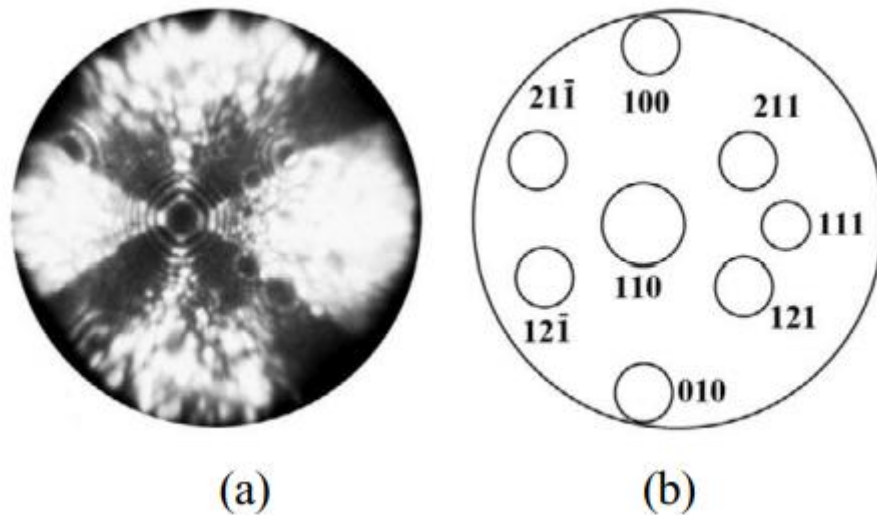
Зображення FIM отримували під тиском газу гелію  $10^{-4}$ – $10^{-3}$  Па. Для контролю температури зразка з точністю до 2–5 K використовувались сильні залежності локальної яскравості зображення та роздільної здатності від температури. Незважаючи на високу щільність іонного струму ( $\sim 10^2$  А см<sup>-2</sup>) на кінчиках зразків, температура поверхневих шарів майже дорівнювала температурі рідкого азоту через високу теплопровідність голкоподібних зразків. Вплив температури на голкоподібні зразки можна спостерігати лише при щільності струму вище  $\sim 10^7$  А см<sup>-2</sup> [4].

Методикою визначення міцності на розрив нанородів молібдену слугує метод високого поля, що включає механічне навантаження та моделювання молекулярної динаміки. Межі міцності на розрив визначали при низьких температурах у разі прикладання одновісного напруження в напрямку  $\langle 110 \rangle$ .

Механічне навантаження виконувалось за допомогою імпульсного генератора. Механічне навантаження виникало в результаті прикладання загальної напруги, рівної постійній напрузі, необхідній для формування зображення FIM та імпульсної напруги. Для вимірювання швидкості випаровування від  $10^4$  шарів s<sup>-1</sup> до  $10^6$  шарів s<sup>-1</sup> використовували генератор імпульсів із тривалістю імпульсу 1,5–20  $\mu$ s.

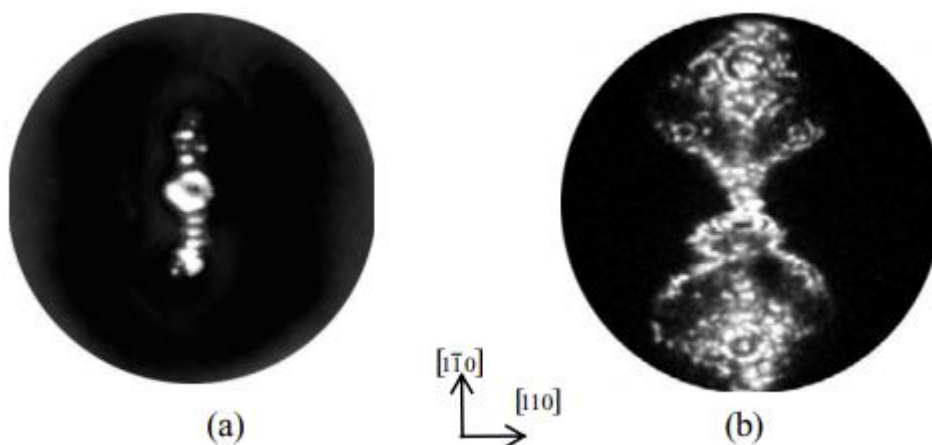
Щоб уникнути руйнівного електричного пробою після руйнування наконечника, зразки послідовно підключали до джерела постійного струму опором  $10^9$   $\Omega$ . Хоча постійну напругу можна визначити з високою точністю та відомою похибкою ( $\pm 0,1\%$ ), вимірювання імпульсної напруги вимагає додаткового калібрування, головним чином через практичні труднощі при визначенні коефіцієнта посилення імпульсу. Поправки на імпульсну напругу визначали за виміряною швидкістю випаровування поля, змінюючи висоту імпульсу до прямого відношення напруги, щоб отримати однакову швидкість випаровування поля [4].

Аналіз FIM показав, що до розриву нанокристали не мали дислокацій, імовірно через "механічний відпал" під механічним напруженням, близьким до ідеальної напруженості електричного поля, і завдяки силі зображення, що надходить від поверхні металу. Ця знахідка є важливою для точного визначення властивої міцності на розтяг нанокристалів [4].



а – до руйнування, б – відповідної стереографічної проєкції

Рисунок 1.8 – Зображення FIM монокристалічної наноголки молібдену при 77 K [4]



а –  $V_0 / V_p = 0$ , б –  $V_0 / V_p = 0.55$

Рисунок 1.9 – Зображення FIM монокристалічного нанокристалу молібдену після руйнування при 77 K. Тривалість високовольтного імпульсу становить 20 нс [4]

Експериментально показано, що пластична деформація бездислокаційних нанокристалів при низьких температурах надає їх руйнуванню, і було підтверджено, що міцність нанокристалів ОЦК металів контролюється локальною нестабільністю зсуву. Зображення FIM після механічних випробувань у високому полі вказують на пластичний режим руйнування монокристалів з утворенням кінчика зубила шляхом багаторазового ковзання в системах деформації  $(11\bar{2}) [111]$  та  $(112) [11\bar{1}]$ . За даними, отриманими від одновісного натягу.

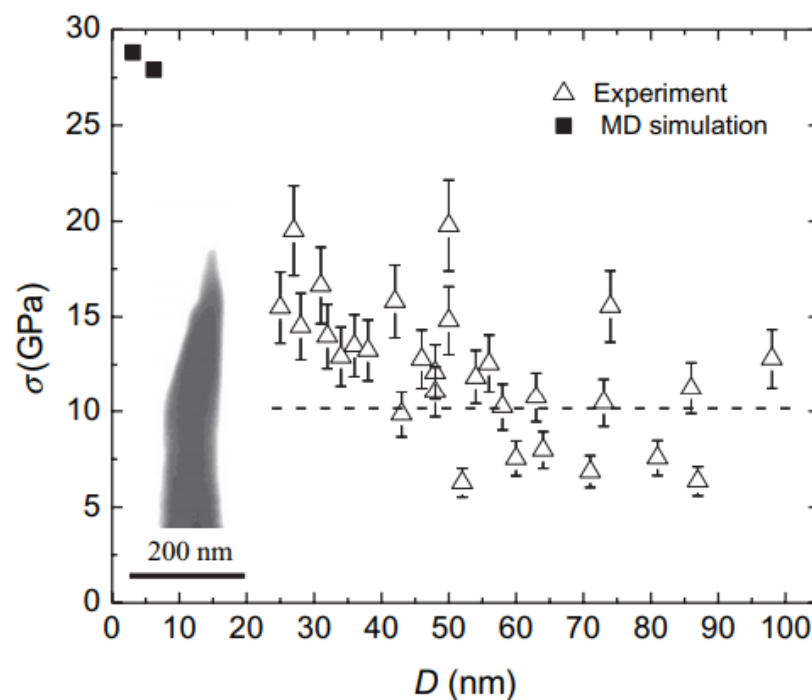


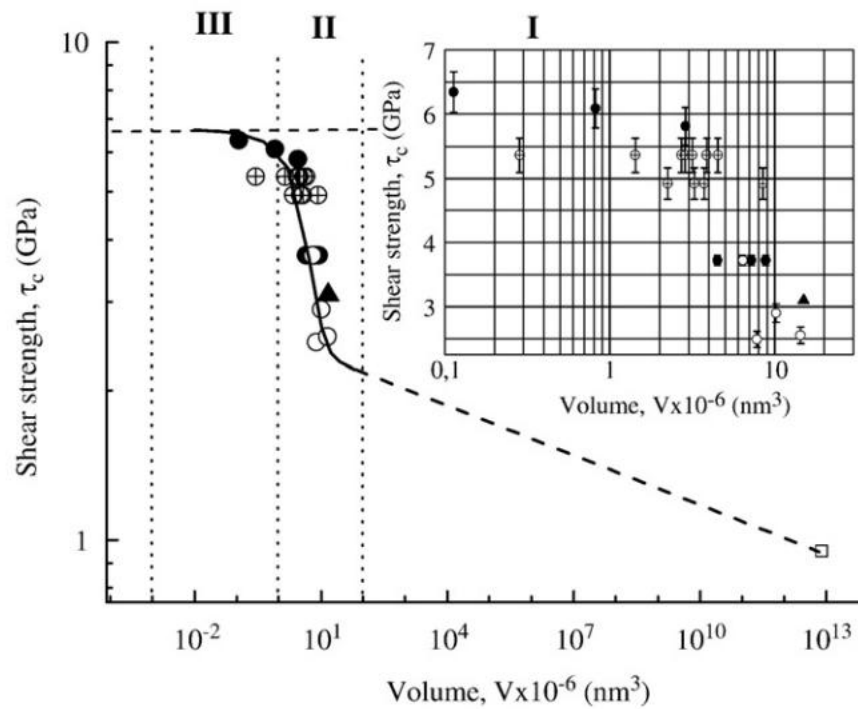
Рисунок 1.10 – Межа міцності нанокристалів молібдену при 77 K; на вставці показано TEM-зображення молібденового накінчика після руйнування долотого краю [4]

При випробуваннях голкоподібних зразків монокристалічного молібдену, орієнтованих на  $\langle 110 \rangle$ , діаметр на вершині яких варіюється від 25 нм до 90 нм, міцність Мо зменшилась з 19,8 ГПа до 6,3 ГПа відповідно. Це зменшення міцності на розрив без дислокаційних наноконечків молібдену може пояснюватися як зменшенням міцності голчастих зразків зі збільшенням діаметра

(ефект розміру), так і концентрацією напружень, спричинених нерівностями атомного масштабу вздовж бокової поверхні голкоподібного зразка.

Молекулярно-динамічне моделювання розтягу наноголок Мо передбачало зменшення міцності з 28,8 ГПа до 21,0 ГПа зі збільшенням діаметра з 3,1 нм до 15,7 нм. Хоча спостерігається значне розсіювання експериментально отриманих значень міцності, помітний ефект розміру також є очевидним. Вважається, що максимальні значення вимірюваної міцності відповідають властивості міцності нанокристалів Мо під одновісним натягом (19,8 ГПа або 7,5% від модуля Юнга) [4].

Для дослідження міцності наноголок буде актуальним дослідження об'ємного металевого скла (ОМС) яке було розглянуто в роботі [5], в якій досліджували міцність на розрив об'ємного металевого скла на основі цирконію високопольовим методом механічного навантаження з використанням польової іонної мікроскопії (FIM), так як металеве скло забезпечує вищу міцність і твердість порівняно з кристалічними твердими речовинами. Показано, що походження дуже високої міцності на розрив аморфних сплавів зумовлене рівномірним розподілом атомних скупчень. За відсутності внутрішніх дефектів, таких як дефекти усадки та дислокації, міцність металевого скла вважається близькою до ідеальної міцності твердих речовин. Однак існування зовнішніх дефектів лиття (пустот, оксидів, включень, внутрішні межі тощо) ускладнює визначення межі пружності металевого скла.



- – значення міцності, отримане при ударному навантаженні при 77K;
- ⊕ - випробування на удар при T = 60K;
- – напруження руйнування при квазістатичному навантаженні;
- ▲ – опір зсуву при наноіндентації;
- – напруга руйнування на зсув макроскопічних зразків.

Рисунок 1.11 – Міцність на зсув нанокінчиків ОМС на основі Zr як функція об'єму калібрування. Діапазон похибок вимірювального об'єму знаходиться в межах 30% [5]

Метод механічного навантаження пондеромоторними силами дозволяє безпосередньо визначити ефект масштабу в нанометровому діапазоні для об'ємного металевих скла який ми спостерігаємо на рисунку 1.11. Крім того, цей метод підходить для оцінки міцності окремих скупчень ОМС.

Залежність сили ОМС від об'єму має три області, які відрізняються одна від одної законом зміни сили. Для лише макро- та мікроскопічних об'ємів ( $V > 100 \times 10^6 \text{ nm}^3$ ) статистика Вейбулла є дійсною. У межах цього нанометрового діапазону ( $100 \times 10^6 \text{ nm}^3 \geq V \geq 1,5 \times 10^6 \text{ nm}^3$ ) слід використовувати загальний статистичний закон для розподілу мінімальних міцностей. При меншому обсязі

матеріалу ( $V < 1,5 \times 10^6 \text{ нм}^3$ ) сприйнятливості міцності до об'єму різко зменшується.

Припускаючи, що при обох критичних розмірах ядро зсувної нестабільності має той самий порядок, що і розмір кластера  $\approx 10 \text{ нм}$ , а середня відстань між такими ядрами на порядок більше розміру кластера, тобто дорівнює  $100 \text{ нм}$ , тоді об'єм, при якому  $\rho V = 100$ , дорівнює  $100 \times 10^6 \text{ нм}^3$ . Цей обсяг повинен обмежувати діапазон застосовності розподілу Вейбулла знизу (рис. 1.11). При таких припущеннях значення, що відповідає лінії в області "I" на Рисунку 1.11, дорівнює  $20,1$ . Це значення лежить в межах діапазону, типового для об'ємного металеві окуляри ( $20-70$ ) і досить близькі до значення  $25,5$  для крихкого ( $Zr_{48}Cu_{45}Al_7$ ) скла. Отримані в цій роботі величини міцності нанооб'ємів металевого скла лежать в областях «II» та «III», де статистика Вейбулла не відповідає дійсності. Зона «II» може розглядатися як ділянка, де ймовірність ініціювання руйнування описується залежністю:

$$P(\tau) = 1 - [1 - P_0(\tau)]^{\rho V} \quad (1.1)$$

Нижня межа цієї області обмежена об'ємом, починаючи з якого типовий розмір зразка становить менше  $10$  розмірів скупчення. При такому малому обсязі матеріалу ймовірність події трансформації зсуву (ПТЗ) має бути досить малим значенням. Це призведе до того, що напруга ПТЗ перевищить величину напруги, необхідну для його поширення. Це означає, що критична подія руйнування в зоні «III» повинна бути пов'язана з її зародком, а не з нестабільністю. Це призведе до зменшення сприйнятливості величини міцності до об'єму (область «III» на Рисунку 1.11). Отримане в цій роботі максимальне експериментальне значення напруги руйнування сплаву  $Zr_{41}Ti_{14}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22.5}$  у литому стані без включень та мікротріщин становить  $6,3 \text{ ГПа}$  при робочому обсязі зразка, що дорівнює  $0,113 \times 10^6 \text{ нм}^3$  (діаметр зразка  $60 \text{ нм}$ ).

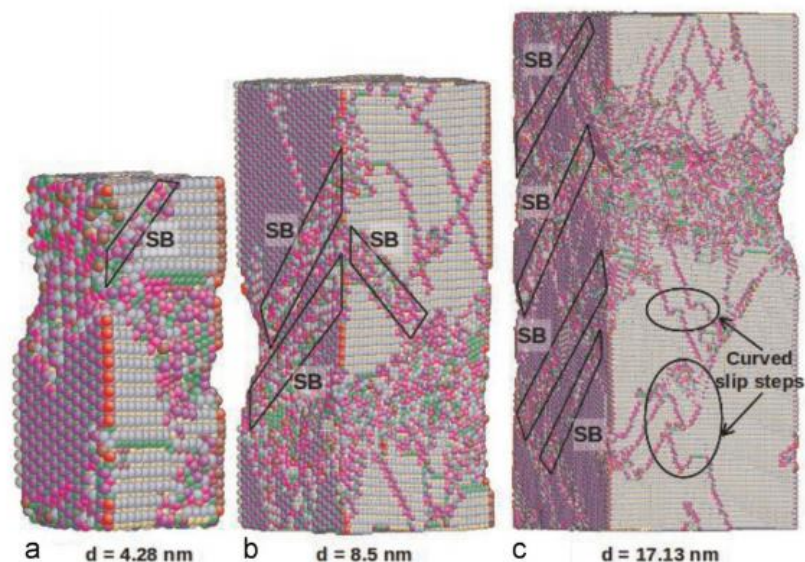
## **1.2 Аналіз методів комп'ютерного моделювання одновісної деформації розтягом та стиском нанодротів металів з ОЦК ґраткою**

Основним механізмом який збільшує міцність нанодротів є збільшення рівня стискаючих напруг в центральній частині нанозразка при зменшенні їх поперечного розміру. Відповідно до цього підходу, зумовлені дією сил поверхневого натягу стискаючі напруги віднімаються з прикладених, збільшуючи тим самим необхідний для втрати стійкості зразка рівень прикладених напружень. У цьому випадку зі зменшенням діаметра рівень міцності нанозразка повинен збільшуватися, що узгоджується з даними МД-моделювання для ГЦК-металів для трьох кристалографічних напрямку [100], [110] і [111]. Однак така спрощена механістична трактування розмірного ефекту не дозволяє пояснити зворотну тенденцію в зміні міцності при розтягуванні в напрямку [110] нанодроту з ОЦК-металу, як було згадано у [1]. На відміну від нанодротів ГЦК-металів орієнтацій [100], [110], [111] і ОЦК-металів орієнтації [100] при розтягуванні нанодроту Мо і інших ОЦК-металів в напрямках [110] і [111] спостерігається аномальний розмірний ефект, який полягає в зменшенні міцності при зменшенні діаметра нанодроту. Причиною цієї аномалії є різні типи дефектів, утворення яких призводить до втрати стабільності нанодроту. При розтягуванні нанодротів ОЦК-металів в напрямках [110], [111] локальна нестабільність пов'язана з утворенням нестійких дислокацій в тонкому поверхневому шарі, де дія сил поверхневого натягу призводить до збільшення рівня локальних дотичних напружень, тобто сприяє реалізації локальної нестабільності. При розтягуванні в напрямку [100], міцність нанодроту контролюється напругою утворення двійника. В цьому випадку, глибина шару, необхідного для утворення нестійкого двійника, перевищує товщину розтягнутого поверхневого шару. Це знижує результуючу величину діючих локальних дотичних напружень в області, де утворюється двійник, і призводить до збільшення міцності нанодроту.



Рисунок 1.12 – Схема утворення дефектів і розподілу напруг по обсягу нанозразка, які утворюються в результаті дії сили поверхневого натягу: «+», «-» – розтягуючі і стискаючі напруження

У статті [7] спостерігалось утворення нерівноважних дислокацій і двійників. МД-моделювання проводили для вивчення впливу розміру на поведінку деформації при розтягуванні нанодротів Fe  $\langle 110 \rangle$  ОЦК.



(a)  $d = 4.28$  нм, (b)  $d = 8.5$  нм, (c)  $d = 17.13$  нм

Рисунок 1.13 – Деформаційна поведінка в нанодротах Fe  $\langle 110 \rangle$  ОЦК як функція ширини поперечного перерізу при деформації 20% [7]

Видно збільшення кількості кроків ковзання (ST) та смуг ковзання (SB) зі збільшенням розміру нанодроту. Вигнуті кроки ковзання у нанодроті великих розмірів можна побачити в (с). Атоми забарвлені відповідно до їх координаційного числа.

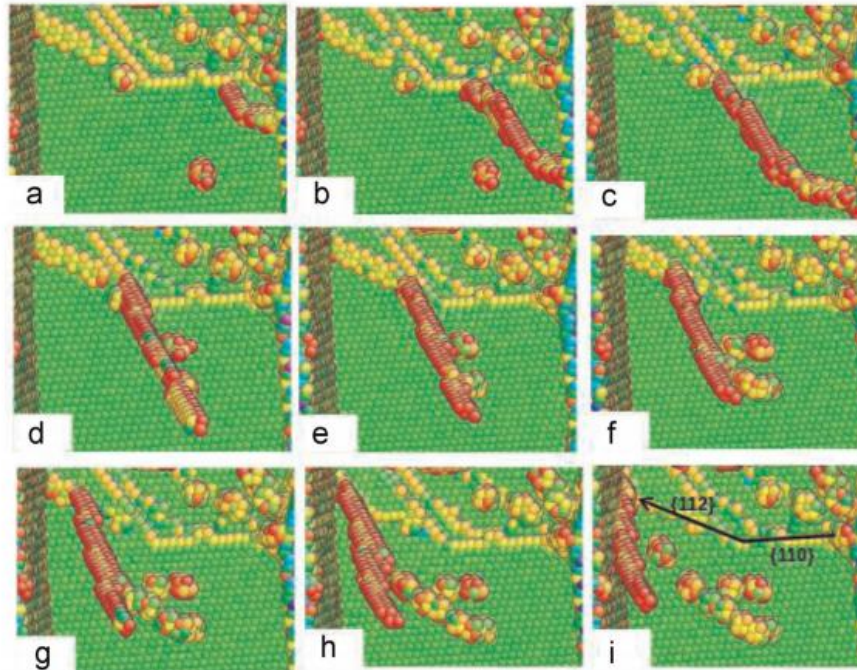


Рисунок 1.14 – Послідовний процес руху гвинтових дислокацій у нанодротах великого діаметра Fe  $\langle 110 \rangle$  ВСС ( $d = 17,13$  нм) [7]

Рисунок 1.14 показує перехресне ковзання дислокації з площини  $\{110\}$  до площини  $\{112\}$ . Створення великої кількості точкових дефектів можна побачити в (e – i).

На рисунку 1.15 межі близнюків (ТВ), що супроводжують часткові дислокації  $1/6 \langle 111 \rangle$ , можна побачити в (a – c). Атоми забарвлені відповідно до параметра центральної симетрії (CSP). Пурпурова стрілка вказує напрямок руху повної дислокації, а синя стрілка - рух часткових дислокацій.

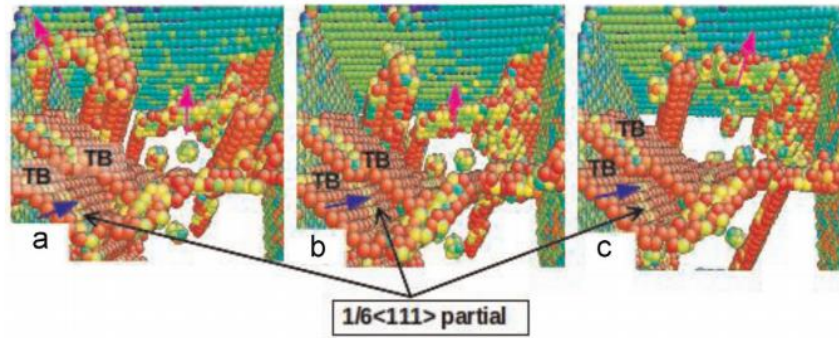
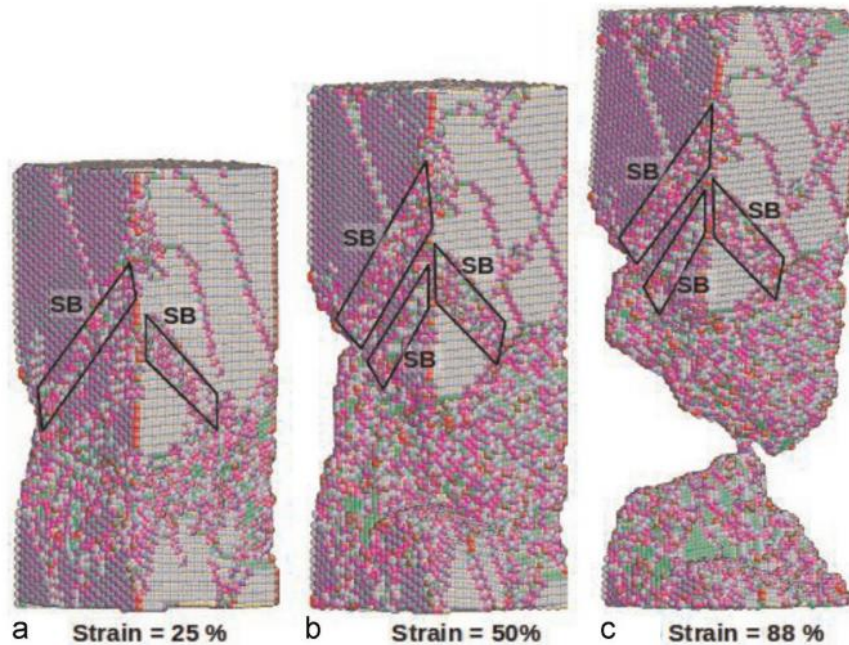


Рисунок 1.15 – Детальний огляд мікроструктурних особливостей під час пластичної деформації нанодоту Fe  $\langle 110 \rangle$  ОЦК ( $d = 8,5$  нм) при 18% деформації [7]

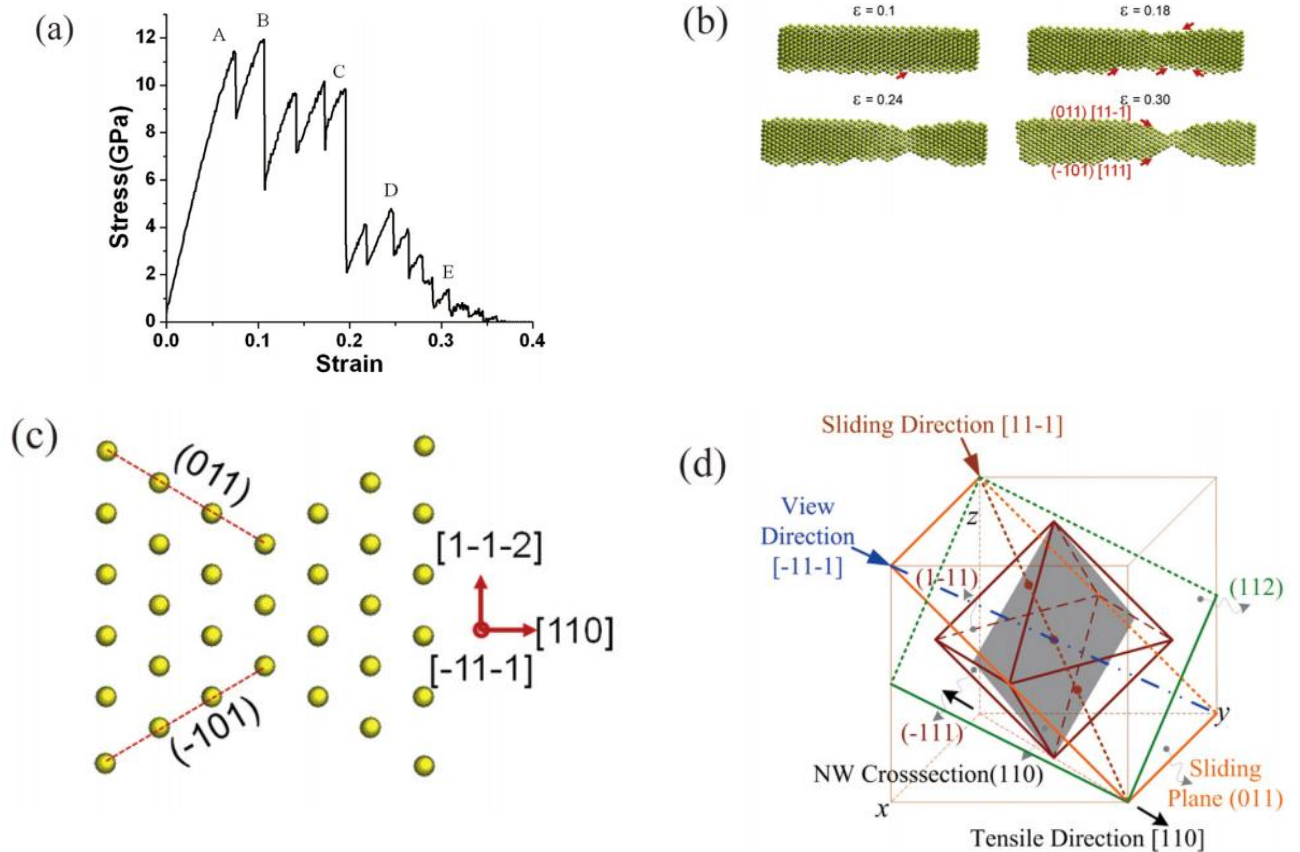


а – Кроки ковзання внаслідок виходу дислокацій, б – Лінії ковзання, що перетинаються через активацію багатократного ковзання, с – Руйнування шляхом зрізу.

Рисунок 1.16 – Поведінка пластичної деформації в ширині нанодоту Fe  $\langle 110 \rangle$  ОЦК,  $d = 8,5$  нм як функція деформації. Атоми забарвлені відповідно до їх координаційного числа [7]

Деформація розтягування характеризувалась початковою пружною деформацією з подальшою текучістю та пластичною деформацією, керованою механізмом дислокаційного ковзання, у всіх досліджуваних розмірах нанодротів. Вихід відбувався через колективне випромінювання петель дислокацій з кута нанодроту. Зі збільшенням пластичної деформації спостерігається скупчення великої кількості прямолінійних дислокацій. Наявність вигнутих кроків ковзання, що означають появу поперечного ковзання, спостерігалось у нанодротів великих розмірів. Немає жодних ознак поперечного ковзання у нанодротах малих розмірів. Модуль і межа текучості Юнга демонстрували швидке збільшення значень із збільшенням розміру для нанодротів невеликого розміру з наступним насиченням при більших розмірах. На противагу цьому, напруга потоку демонструвала швидке зменшення зі збільшенням розміру для нанодротів малого розміру з наступним насиченням при більших розмірах.

У [8] було проведено систематичне дослідження механізмів деформації Мо нанодроту за допомогою MD -моделювання.



а – Крива напруження-деформація 2 нм Мо нанодроту із орієнтацією  $\langle 110 \rangle / \{ 111 \}$ ; б – знімки атомної конфігурації нанодроту (напрямок вигляду  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ) при різних деформаціях натягу, що відповідають буквам BCDE в (а); в – проекція ОЦК-гратки в області горловини вздовж  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ; г – системи ковзання в ОЦК металів, затінена область показує форму поперечного перерізу нанодроту  $\langle 110 \rangle / \{ 111 \}$   
 Рисунок 1.17 – Результати дослідження механізмів деформації Мо нанодроту за допомогою MD -моделювання [8]

Було встановлено, що як орієнтація, так і поперечний розмір відігравали важливу роль у пластичній деформації нанодротів. Для  $\langle 110 \rangle / \{ 111 \}$  нанодротів системи ковзання переважно вибираються як (011)[11 $\bar{1}$ ] та ( $\bar{1}$ 01)[111] нижчою поверхневою енергією фасок, викликаних ковзанням. Як для  $\langle 100 \rangle / \{ 110 \}$ , так і для  $\langle 100 \rangle / \{ 100 \}$  нанодротів, прогресивний процес ковзання призводить до рівномірного подовження на 41% і переорієнтує вісь дроту  $\langle 100 \rangle$  на  $\langle 110 \rangle$ . Механізм переорієнтації перестає працювати для  $\langle 100 \rangle / \{ 110 \}$  нанодротів із  $d < 1$  нм або  $d > 8$  нм. Для ультратонких нанодротів атомний ланцюг утворюється після

виходу з поверхнею, що нагадує щільно упаковані ОЦК площини. Для великих нанодротів вона має тенденцію до активних множинних систем ковзання. Розглянута теоретична модель успішно пояснює величину залежності напружень плинності.

### 1.3 Модель розмірного ефекту

При побудові моделі розмірного ефекту необхідно врахувати три принципові особливості механізму втрати стабільності нанорозмірних дротів, а саме:

- Втрата стабільності кристалічної решітки являється зсувною за своєю природою, результатом цієї нестабільності є утворення дислокацій або двійників;

- Втрата стабільності кристалічної решітки локалізується у поверхневому шарі зразка, де діють максимальні дотичні напруження;

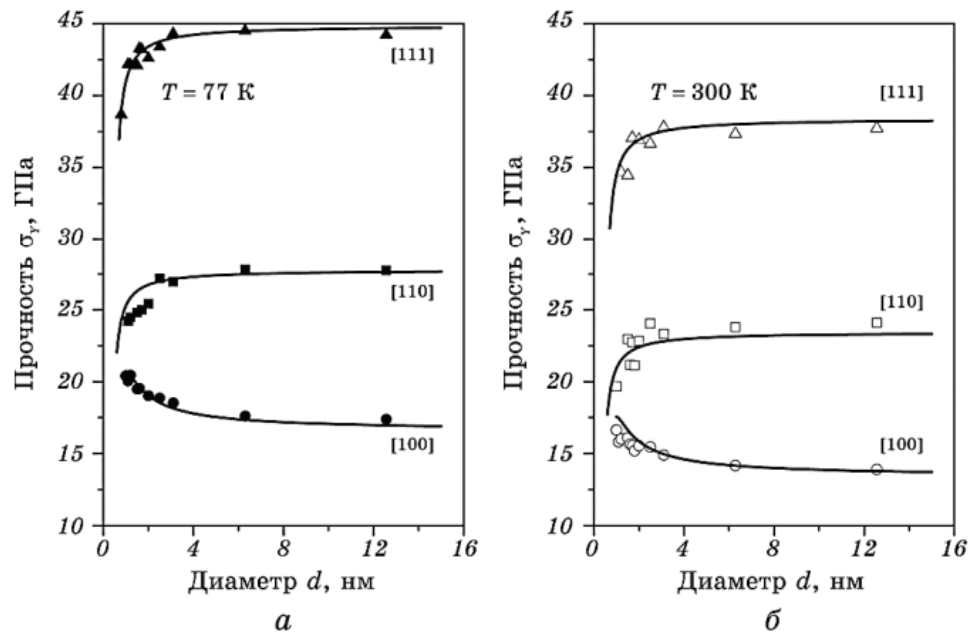
- Перехід від пружних до пластичних деформацій пов'язаний з втратою стабільності нанодроту в локальній області критичного розміру, достатньої для утворення нерівноважної дислокації або двійника. При цьому необхідно врахувати, що розподіл локальних напруг в поперечному перерізі нанозразка є істотно неоднорідним (перехід від стискаючих до розтягуючих напруг відбувається на відстані, порівнянній з декількома міжатомними відстанями). У такій ситуації умова реалізації локальної нестабільності може бути описана як досягнення критичного рівня ефективних однорідних напружень, що діють в межах поверхневого шару ефективної товщини  $h_1$ . В цьому випадку  $h_1$  слід розглядати як константу матеріалу, абсолютна величина якої порівнянна з міжатомною відстанню. Виходячи з умови рівноваги ненагруженого циліндричного нанозразка, можна отримати вираз для ефективних розтягуючих однорідно розподілених напружень  $\sigma_{xx}^{sf}$ , діючих в поверхневому шарі глибиною  $h_1$ :

$$\sigma_{xx}^{sf} = \frac{f_{xx} d}{h_1(d - h_1)}, \quad (1.1)$$

де  $f_{xx}$  - сила поверхневого натягу, що діє уздовж осі нанозразка,  $d$  - діаметр зразка. Відповідно, вираз для стискають напруг  $\sigma_{xx}^{vol}$  в центральній частині нанозразка має вигляд:

$$\sigma_{xx}^{vol} = -\frac{4f_{xx}d}{(d - 2h_1)^2}. \quad (1.2)$$

Нестабільність нанокристалів ОЦК-металів обумовлена утворенням нестійких дислокацій при розтягуванні в напрямках [110] і [111] і двійників при розтягуванні в напрямку [100]. У першому випадку дислокації утворюються в розтягнутому поверхневому шарі товщиною порядку довжини вектора Бюргерса. У цьому шарі діють розтягують поверхневі напруги, які полегшують утворення нестійкою дислокації. Зі зменшенням діаметра нанодроту рівень цих напруг зростає, що повинно призводити до зменшення напруги втрати стабільності нанозразка, тобто його міцності (рис. 1.18).



а – 77 К, б – 300 К

Рисунок 1.18 – Залежність міцності зразка нанодроту Мо від їх діаметра в умовах одновісного розтягу в напрямках [100], [110], [111] [6]

Вираз для критичного напруження втрати стабільності нанозразка цієї орієнтації має вигляд:

$$\sigma_Y = (\tau_c - t\sqrt{D})/m, \quad (1.3)$$

де  $\tau_c$  – значення критичного дотичного напруження утворення дислокації,  $m$  – орієнтаційний фактор,  $t\sqrt{D}$  – флуктуаційна складова локальних дотичних напружень, яка характеризує вплив температури на величину критичного напруження зсувної нестійкості ( $t$  – константа,  $D$  – величина дисперсії локальних дотичних напружень, обумовлена тепловими коливаннями атомів),  $\alpha_1$  – коефіцієнт, який враховує вплив багатовісного локального напруженого стану на величину локальних дотичних напружень. Вираз для міцності  $\sigma_Y$  можна представити таким чином:

$$\sigma_Y = \frac{1}{\alpha_1 m} (\tau_c - t\sqrt{D}) - \frac{\alpha_1 f_{xx} d}{h_1(d - h_1)}. \quad (1.4)$$

Як показано на рисунку 1.18, ця залежність добре узгоджується з результатами молекулярно-динамічного моделювання розтягування нанодроту в напрямках [110] і [111]. Дещо інша ситуація спостерігається при утворенні дефекту упаковки при розтягуванні нанодроту ГЦК-металів в напрямках [100], [110], [111], або двійника при розтягуванні нанодроту ОЦК-металів в напрямку [100]. У цьому випадку глибина області, де утворюється дефект, перевищує товщину розтягнутого шару і потрапляє в область, де діють стискають напруги (рис. 1.18). Це призводить до того, що в площині утворення дефекту напрямок дії дотичних напружень змінюється на протилежне, що призводить до зменшення результуючих дотичних напружень, що діють в момент утворення дефекту. В результаті цього, рівень прикладених напруг, необхідних для втрати стабільності нанозразка, тобто його міцність, збільшується, що спостерігається при розтягуванні  $M_0$  в напрямку [100] (рис. 1.18). У цьому випадку верхня оцінка для величини міцності нанодроту має вигляд:

$$\sigma_Y = \frac{1}{m} (\tau_c - t\sqrt{D}) - \frac{f_{xx} d}{1 + \beta} \left[ \frac{\alpha_1}{h_1(d - h_1)} - \frac{4\alpha_2\beta}{(d - 2h_2)^2} \right], \quad (1.3.5)$$

де

$$\beta = \frac{h_2}{h_1} \left[ 1 - \frac{h_1 + h_2}{d - h_1} \right],$$

$h_2$  – товщина шару, в межах якого на дефект діють протилежно спрямовані дотичні напруження (рис 1.12),  $\alpha_2$  – аналог коефіцієнта  $\alpha_1$  для другого випадку,  $\beta$  – характеризує співвідношення площ площині ковзання, що потрапляють в область дії стискаючих і розтягуючих напружень. Другий член в квадратних дужках описує зменшення величини дотичних напружень в результаті дії стискаючих напруг у внутрішньому шарі (рис 1.12). Залежність з достатньою точністю описує закономірності збільшення міцності нанодроту  $M_0$  в напрямку

[100] зі зменшенням її діаметра. В граничному випадку  $d \gg h_1$  величина напруг, що розтягують в поверхневому шарі прагне до постійного значення:

$$\sigma_{xx}^{sf} = f_{xx} / h_1. \quad (1.3.6)$$

Отже,  $\sigma_Y$  для орієнтацій [110] і [111] перестає бути залежним від діаметра нанозразка, тобто розмірний ефект повинен зникати. В цьому випадку:

$$\sigma_Y = \frac{1}{m} (\tau_c - t\sqrt{D}) - \frac{f_{xx}}{h_1}. \quad (1.3.7)$$

Це добре узгоджується з даними, наведеними на рисунку 1.18. Для орієнтації [100] в цьому випадку  $\sigma_Y$  має вигляд:

$$\sigma_Y \approx \frac{1}{m} (\tau_c - t\sqrt{D}) - \frac{f_{xx}}{1+\beta} \left[ \frac{\alpha_1}{h_1} - \frac{4\alpha_2\beta}{d} \right]. \quad (1.3.8)$$

для даної орієнтації величина  $\sigma_Y$  повинна залежати від  $d$ , однак, оскільки  $d \gg h_1$ , вплив на  $\sigma_Y$  другого члена в квадратних дужках має бути незначним, тобто повинна спостерігатися тенденція до «насичення» (рис. 1.19).

## 2 МАТЕРІАЛИ І МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

### 2.1 Загальний опис моделі

В силу малих розмірів нанокристалів, дослідження міцносних властивостей цих об'єктів пов'язане із значними методичними труднощами. В силу чого, в якості основного інструменту використовувався, оптимальний для таких розмірів, метод молекулярної динаміки [9].

Такий обчислювальний експеримент надає можливість доповнити експериментальні дослідження та навіть замінити їх, коли дані недоступні для прямого вимірювання або явища дуже складні. Виконуюча на комп'ютері програма виступає одночасно як прилад, і як досліджувана система. Властивості такої системи визначаються експериментатором (з урахуванням обмежених можливостей комп'ютера). Такий прилад для обчислювального експерименту забезпечує повністю контрольоване середовище. На відміну від фізичного експерименту вимір фізичних величин не викликає ускладнень і збурень, що особливо важливо при дослідженні явищ на нанорівні.

### 2.2 Метод молекулярної динаміки

Метод молекулярної динаміки заснований на поданні матеріалу сукупністю взаємодіючих частинок (матеріальних точок або твердих тіл), для яких записуються класичне рівняння динаміки. Взаємодія частинок описується за допомогою потенціалів взаємодії, основною властивістю яких є відштовхування при зближенні і притягання при віддаленні. Перед початком моделювання задається деяке початкове розповсюдження частинок в просторі (вихідна структура матеріалу) і початковий розподіл швидкостей частинок (механічний і тепловий рух системи в початковому стані). Далі завдання зводиться до вирішення задачі Коші для системи звичайних диференціальних рівнянь.

Для простих металів можна вважати атоми матеріальними точками, таким чином маємо систему з  $6N$  диференціальних рівнянь першого порядку [9]–[10]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\vec{x}}_i = \frac{\vec{p}_i}{m_i}, \\ \dot{\vec{p}}_i = \vec{f}_i = -\vec{\nabla} V_i, \\ i = \overline{1, N}. \end{array} \right. \quad (2.1)$$

де  $i$  – номер атома;  $N$  – кількість атомів в системі;  $x$  – радіус вектор;  $p$  – імпульс;  $m$  – маса частинки;  $f$  – сила;  $V$  – потенціал міжатомної взаємодії.

### 2.3 Вибір програмного забезпечення

LAMMPS – вільний пакет для класичної молекулярної динаміки, написаний групою з Сандійських національних лабораторій. Пакет може застосовуватися для великих розрахунків (до десятків мільйонів атомів). Для роботи на багатопроцесорних системах використовується інтерфейс MPI.

Особливості LAMMPS полягають у:

- Можливості скомпілювати як паралельну версію LAMMPS (використовує MPI), так і версію для запуску в однопроцесорному режимі.
- У LAMMPS реалізована підтримка більшості двочастинкових і багаточастинкових короткодійних потенціалів (потенціали Леннард-Джонса, Морзе, Юкави, EAM, AI-REBO).
- Реалізовано методи Евальда і PPPM (Particle-particle-particle-mesh) для розрахунків сил в системах з кулоновским взаємодією.
- Використання списків сусідів при розрахунках короткодійних сил.
- Є можливість запису атомних конфігурацій в текстовий або бінарний файл. Початкова конфігурація атомів для розрахунку може бути як згенерована в програмі, так і прочитана з бінарного / текстового файлу.
- Є вбудовані можливості аналізу атомної конфігурації "на льоту": побудова парної кореляційної функції, визначення координаційної числа,

параметра центральної симетрії і ін.

– Вбудовані термостати, баростат, методи додавання зовнішніх сил і потенційних стінок.

– Можливість виведення в нативний формат для візуалізатора AtomEye.

– Використання графічних процесорів для розрахунку (технологія CUDA).

Графічні процесори можна використовувати тільки для потенціалів Леннард-Джонса і Кулона.

## 2.4 Параметри термостата

У нашій роботі було застосовано термостат Носі-Гувера для моделювання молекулярної динаміки при постійній температурі. Вплив термостата на частки досліджуваної системи описується, за допомогою неконсервативних сил, що залежать від імпульсів віртуальних частинок. Для підтримки постійної температури в модельному обсязі, застосовувався метод масштабування швидкості атомів на кожному кроці часу:

$$V^c = V^p \left( \frac{T^{\text{target}}}{T^{\text{current}}} \right)^{1/2 \cdot C_{\text{step}}} \quad (2.2)$$

де значення  $C_{\text{step}}$  вибрано рівним 33. Для системи матеріальних точок, якою є прості метали, такий алгоритм є адекватним [10]. Вибране значення  $C_{\text{step}}$  менше такого (одиниця) прийнятого в молекулярній статистиці, це пов'язано з тим, що використання предикторно-корректорного алгоритму дозволяє уникнути дрейфу температури пов'язаного з похибкою розрахунків.

З іншого боку, таке значення  $C_{\text{step}}$  більш плавно релаксує температуру, адекватно моделює процес охолодження і дозволяє уникнути небажаного ефекту «заморожування» скорегованого руху атомів (утворення і рух дефектів, руйнування) обумовленого тим, що температура розраховується на підставі

кінетичної енергії поступального руху атомів в лабораторній системі координат. Слід зауважити, що такий вибір призводить до значного часу первинної релаксації температури .

## 2.5 Розрахунок механічних напружень

Для розрахунку тензора середніх напружень використовувалися загальноприйняті в літературі по молекулярній динаміці формули [10]–[12]:

$$\sigma^{\alpha\beta} = -\frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N f_{ij}^{\alpha} \cdot r_{ij}^{\beta} \quad (2.3)$$

## 2.6 Метод зануреного атома

Розвиток електронної теорії призвів до створення методу функціоналу електронної густини, в якому ключову роль відіграє електронна щільність  $\rho(r)$  в реальному, а не зворотному просторі. Вона грає роль ключової ланки, що зв'язує розрахунки електронної структури з перших принципів і структурні розрахунки на атомному рівні. Розвиток цієї концепції і привів до створення методу зануреного атома.

Для такого потенціалу енергія зв'язку виражається у вигляді суми парної  $E_c^p$  і нелокальної  $E_c^v$  складових:

$$E_c = E_c^p + E_c^v, \quad (2.4)$$

де парна частина

$$E_c^p = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \varphi(r_{ij}) \quad (2.5)$$

а нелокальна складова представлена у вигляді функціоналу електронної густини  $F(\rho(r))$  в місці розташування іона

$$E_c^V = \sum_i F_i(\rho_i), \quad (2.6)$$

де  $F_i$  – функціонал електронної щільності  $\rho_i \equiv \rho(r_i)$  в  $i$ -вузлі решітки (або енергія занурення), яка дорівнює сумі електронної щільності від оточуючих атомів  $\rho^a$

$$\rho_i = \sum_j \rho_j^a(r_{ij}). \quad (2.7)$$

Як  $\rho$  так і  $F(\rho)$  можна розрахувати з перших принципів, проте їх використання для моделювання динаміки ґратки потребує використання потужних комп'ютерних кластерів, у зв'язку з чим, у більшості випадків використовують спрощені аналітичні вирази для функціоналу електронної густини.

## 2.7 Потенціал для W

Потенціалом для нашого дослідження було обрано «w.eam4.fs»

Потенціал для вольфраму обирався з аналізу набору теоретично можливих потенціалів, які були взяті з [21]. З цією метою проводилось моделювання розтягу нанорозмірного вольфрамового дроту. Цей розтяг моделювався для кристалографічного напрямку [111], який вважається найбільш складним для МД-моделювання. Це полегшує виявлення непридатності використання того, чи іншого потенціалу для розв'язання поставленої задачі. На рисунку 2.1. наведені графічні залежності напруження від деформації для досліджуваних потенціалів.

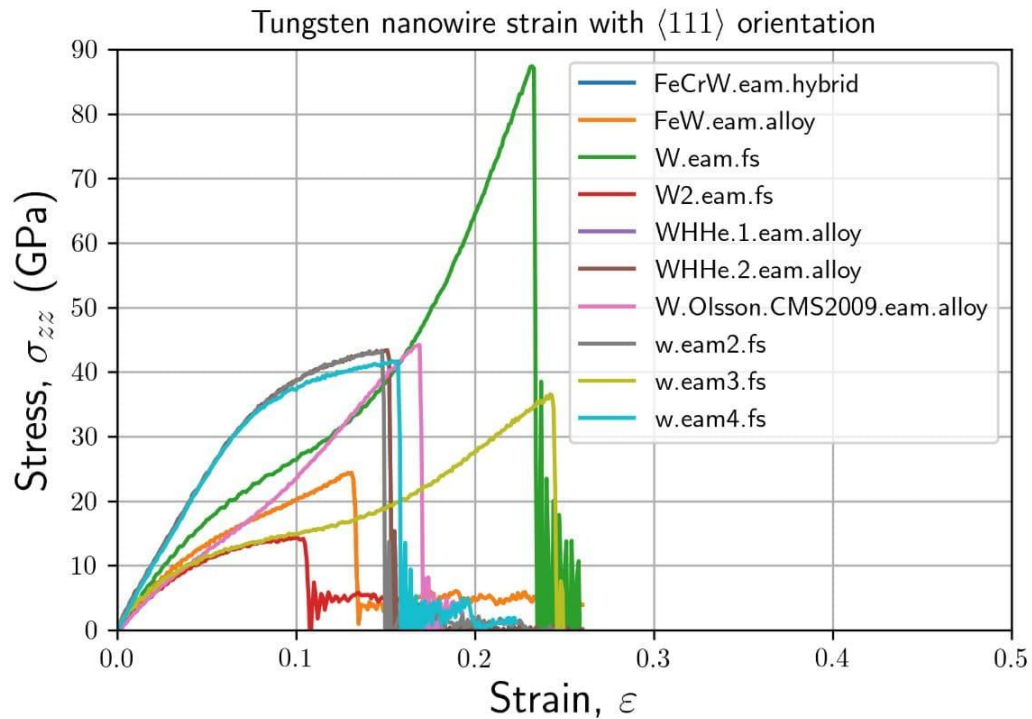


Рисунок 2.1 – Графічна залежність напруження від видовження для потенціалів вольфраму

Значення міцності, які отримані при використанні потенціалів w.eam2.fs, w.eam4.fs, WHHe.2.eam.alloy. найближчі до значення  $\sim 40$  ГПа, що дають першопринципні розрахунки.

Із цих трьох потенціалів перевага була надана потенціалу w.eam4.fs, оскільки він калібрувався не лише по пружним сталим, але і по значенням енергії утворення точкових дефектів. При утворенні цих дефектів має місце значне відхилення атомів від положення рівноваги, що має принципове значення для калібровки потенціалів, які використовуються для моделювання руйнування.

	Target Value	Potential EAM1	Potential EAM2	Potential EAM3	Potential EAM4
Bulk properties					
$a_0$ BCC (Å)	3.1648 <sup>a</sup>	3.18582	3.14000	3.18737	3.14339
$a_0$ FCC (Å)	4.054 <sup>b</sup>	4.01354	4.05344	4.19949	4.05342
$E_{\text{coh}}$ BCC (eV/atom)	-8.9 <sup>a</sup>	-8.9003	-8.89998	-8.9001	-8.89997
$E_{\text{coh}}$ FCC (eV/atom)	-8.43 <sup>b</sup>	-8.4102	-8.42999	-8.4456	-8.43000
$C_{11}$ (GPa)	523 <sup>a</sup>	523	544	519	523
$C_{12}$ (GPa)	203 <sup>a</sup>	203	208	203	202
$C_{44}$ (GPa)	160 <sup>a</sup>	160	160	159	161
Defect properties					
$E_f^{(111)}$ (eV)	10.53 <sup>b</sup>	10.53	10.52	10.53	10.53
$E_f^{(110)}$ (eV)	10.82 <sup>b</sup>	10.83	10.82	10.95	10.82
$E_f^{(100)}$ (eV)	12.87 <sup>b</sup>	12.89	12.86	11.18	12.72
$E_f^{\text{OCT}}$ (eV)	13.11 <sup>b</sup>	13.16	12.64	10.99	12.52
$E_f^{\text{TET}}$ (eV)	12.27 <sup>b</sup>	12.27	11.94	11.74	11.87
$E_f^V$ (eV)	3.49 <sup>b</sup>	3.59	3.49	4.38	3.81

<sup>a</sup> Values taken from Landolt-Börnstein [45].

<sup>b</sup> Values computed using the SIESTA GGA code [42].

Рисунок 2.2 – Аналіз потенціалів для вольфраму [22]

Отримані результати також добре узгоджуються із даними, які наведені в статті [23]

## 2.8 Початкові і граничні умови

Початкові положення атомів задавалися точно в вузлах ОЦК ґратки з параметром відповідним модельованому металу. Початкові швидкості підпорядковувалися розподілу Больцмана для відповідної температури. Після цього модельований нанокристал витримується  $2 \cdot 10^{-11} \text{c}$  без застосування граничних умов але з температурним масштабуванням швидкостей. Таким чином, на момент застосування граничних умов випадковими були не тільки швидкості, але і координати атомів, а також вдавалося уникнути напружень обумовлених тепловим розширенням [18]. Граничні умови в моделюванні були періодичними.

## 2.9 Одновісне розтягнення

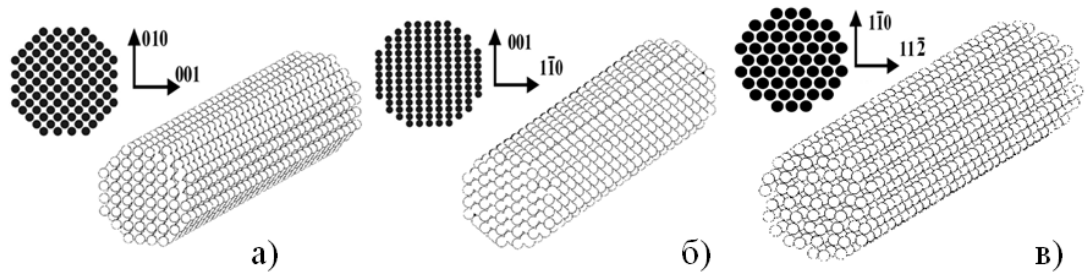
Деформація під час розтягнення здійснювалась кожні 10 кроків моделювання масштабуючи весь бокс в якому було моделювання . Заповнення обсягу зразків атомами проводилося таким чином, щоб кристалічна решітка була зорієнтована обраною кристалографічною віссю вздовж напрямку розтягування.

Вибір форми зразка у вигляді циліндра, а також умови вільної поверхні виключають прояв будь-якої анізотропії викликаної умовами моделювання в напрямках перпендикулярних до напрямку розтягування. Тобто ніякі з цих кристалографічних напрямків (перпендикулярних до осі розтягування) модель особливо не виділяє, на відміну від [111].

## 2.10 Характеристика форми поперечного перерізу і довжини нанозразків

Проведені численні моделювання розтягування нанозразків  $W$  для орієнтацій [100], [110], [111]. Всі процеси моделювання деформації проводилися для температур 77 K і 300 K.

У процесі моделювання розтягування використовувалися зразки циліндричної, а саме створювалися нанодропи з кристалографічним огранюванням, і призматичної форми. На рисунку 2.3 представлені поперечні перетини і самі зразки, які використовувалися в процесі моделювання. Довжина циліндричного зразка мала співвідношення довжини до діаметру як 4:1.



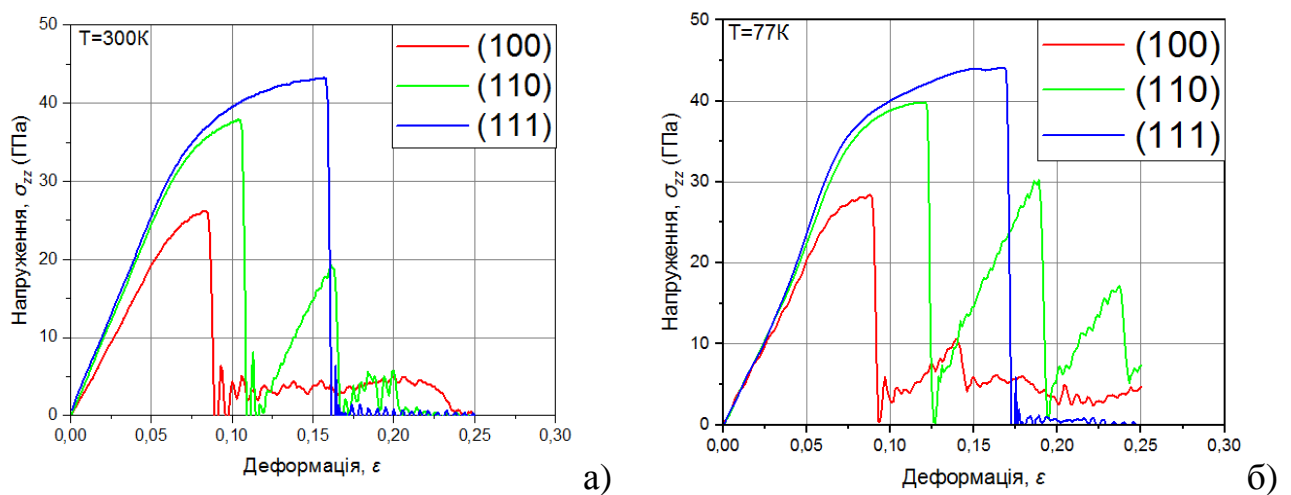
[100] (a), [110] (б) [111] (в)

Рисунок 2.3 – Вихідна форма циліндричних і призматичних нанокристалів W діаметром 2,5 нм та їх поперечних перерізів для моделювання одновісного

## 3 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

### 3.1 Результати комп'ютерного моделювання впливу кристалографічної орієнтації на міцність вольфрамових нанодротів

Під час комп'ютерного моделювання за допомогою LAMMPS було розраховано і побудовано залежності міцності вольфрамових нанодротів відносно трьох кристалографічних орієнтацій (100, 110, 111) за двох температур (77K і 300K) які дозволяють спостерігати механічні характеристики нанодроту.

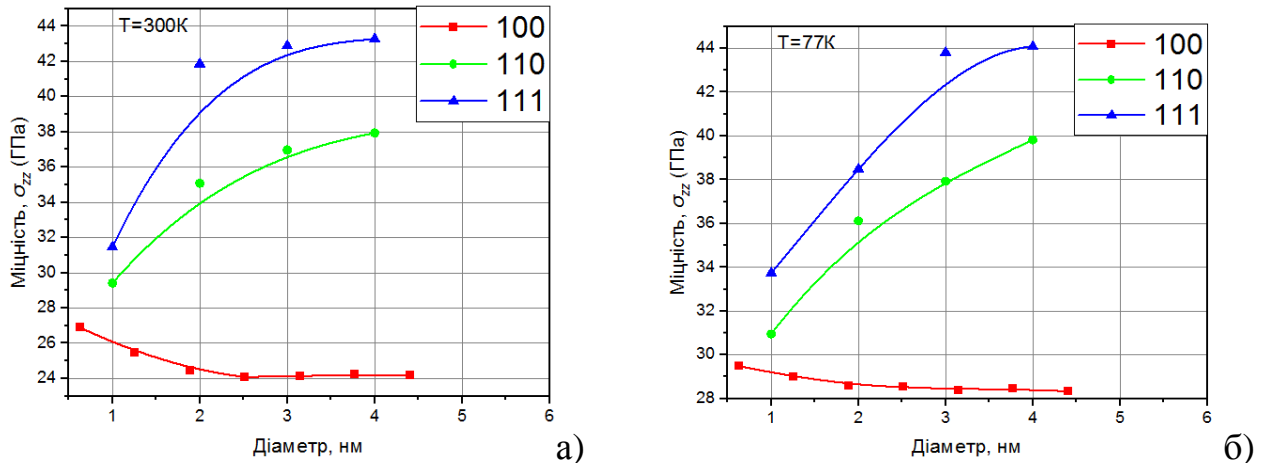


а - 300 К; б - 77 К

Рисунок 3.1 – Графічна залежність напруження від деформації для нанодротів W діаметром 4 нм при одновісному розтягуванні в напрямках [100], [110], [111] при температурах 300 К і 77 К.

Відповідно до отриманих даних ми спостерігаємо пряму залежність міцності нанозразків від кристалографічної орієнтацій. Максимум на залежностях «напруження-деформація» відповідає напрузі утворення нестійкого дефекту, поширення якого в об'ємі зразка призводить до різкого зменшення опору деформації зразка.

На основі отриманих даних побудовано залежності міцності нанодротів W від їх діаметра при температурах деформації 77 К і 300 К (Рисунок 3.2).



а - 300 К; б - 77 К

Рисунок 3.2 – Графічна залежність міцності нанодроту від його діаметру для W при одновісному розтягуванні в напрямках [100], [110], [111] при температурах 300K і 77 K.

### 3.2 Модель впливу діаметра нанодроту на його міцність

У роботах [24], [25], [26] було показано, що втрата стабільності циліндричних нанозразків з Mo і Fe при їх розтягуванні в напрямку [100] супроводжується утворенням і зростанням двійника, а перехід від пружних до пластичних деформацій при розтягуванні в кристалографічних напрямках [110] і [111] ініціюється утворенням нестійких дислокацій. Як впливає з отриманих залежностей, при діаметрах нанозразків, що перевищують 4 нм, міцність залишається практично незмінною. Однак при зменшенні діаметра міцність падає приблизно на 23% для зразків з орієнтаціями [110] і [111], а для зразків, орієнтованих в напрямку [100], міцність, навпаки, збільшується на 6%.

Зміна температури від 77 K до 300 K призводить до деякого зменшення абсолютних значень міцності, однак характер залежності міцності від діаметра зразка залишається незмінним.

Проведений в роботі [27] аналіз атомних перебудов, які призводять до втрати стабільності нанозразків Mo і Fe, показав, що нестабільність

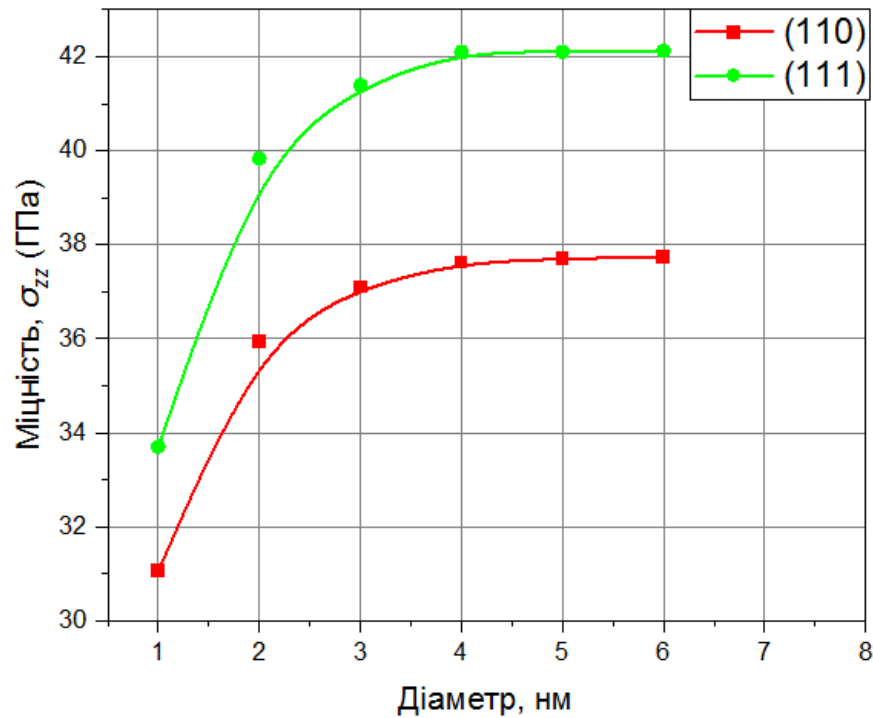
нанокристалів ОЦК-металів обумовлена утворенням нестійких дислокацій при розтягуванні в напрямках [110] і [111] і двійників при розтягуванні в напрямку [100]. У першому випадку дислокації утворюються в розтягнутому поверхневому шарі товщиною порядку довжини вектора Бюргерса. У цьому шарі діють розтягуючі поверхневі напруги, які полегшують утворення нестійких дислокацій. У випадку утворення двійників при розтягуванні нанодроту ОЦК-металів в напрямку [100] глибина області, де утворюється дефект, перевищує товщину розтягнутого шару і потрапляє в область, де діють стискають напруги. Це призводить до того, що в площині утворення дефекту напрямок дії дотичних напружень змінюється на протилежний, що призводить до зменшення результуючих дотичних напружень, що діють в момент утворення дефекту. В результаті цього, рівень прикладених напружень, необхідних для втрати стабільності нанодроту, тобто його міцність, збільшується, що спостерігається при розтягуванні  $W$  в напрямку [100] (рис. 3.2). Більш детальна модель розмірного ефекту була розглянута у літературному огляді.

### 3.3 Порівняння теоретичної залежності міцності нанодроту від його діаметра з результатами МД-моделювання

Для верифікації моделі була проведена апроксимація отриманих результатів за формулою :

$$R_c \approx R_{\text{бес}} + \frac{f_{zz}}{h} - \frac{f_{zz}d}{h(d-h)} \quad (3.1)$$

В результаті ми отримали теоретичну залежність розмірного ефекту при  $h$  рівному  $3,1 \text{ \AA}$ . Графік цієї залежності зображено на рисунку 3.3



Суцільні лінії – теоретична крива

Точки – результати молекулярно-динамічного моделювання

Рисунок 3.3 – теоретичну залежність міцності нанодропу від його діаметру для W при одновісному розтягуванні в напрямках [110], [111].

Отримані залежності міцності МД-моделювання підтверджують раніше розглянуті теоретичні залежності, при яких для ОЦК-металів розтягування в напрямках [110] і [111] зі зменшенням діаметра показує, аномальний, зворотній масштабний ефект який обумовлений впливом діаметра нанодропу на величину сили поверхневого натягу, дія якої полегшує утворення нерівноважних дислокацій у приповерхневому шарі нанодропу.

## 4 РОЗДІЛ ОХОРОНИ ПРАЦІ

Умови виконання науково-дослідної роботи повинні гарантувати безпечність умов праці інженера-дослідника. Сучасні методи дослідження обладнання наукових лабораторій повинні виключати можливість травмування робітників, створювати нормальні умови праці, усувати вплив шкідливих факторів, що призводять до виникнення професійних хвороб [28].

Мета розділу – аналіз небезпечних та шкідливих факторів, які виникають під час молекулярно-динамічного моделювання впливу кристалографічної орієнтації на величину масштабного ефекту для міцності вольфрамових нанодротів та розробка заходів і засобів для їх усунення.

### **4.1 Правові та організаційні основи охорони праці під час роботи за комп'ютером**

Відповідно до ст. 13, Закону України «Про охорону праці» [29], роботодавець зобов'язаний створити на робочому місці в кожному структурному підрозділі умови праці відповідно до нормативно-правових актів, а також забезпечити додержання вимог законодавства щодо прав працівників у галузі охорони праці. Роботодавець несе безпосередню відповідальність за порушення зазначених вимог.

Відповідно до ст.14, Закону України «Про охорону праці» [29] обов'язки працівника щодо додержання вимог нормативно-правових актів з охорони праці – Працівник несе безпосередню відповідальність за порушення зазначених вимог.

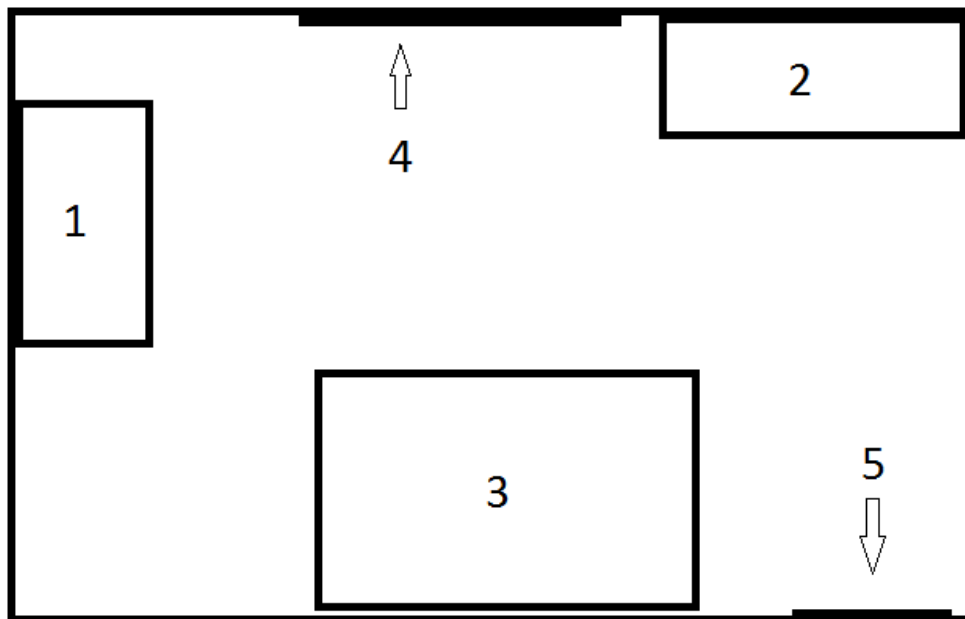
### **4.2 Аналіз параметрів приміщення**

Робота проводиться у робочій кімнаті, за комп'ютером, характеристики приміщення в якому знаходиться робоче місце зведені в таблиці 4.1.

Таблиця 4.1 – Характеристики робочого приміщення

Довжина, м	5
Ширина, м	4
Висота, м	3
Площа, м. кв.	20
Об'єм, м. куб.	60

Площа даного приміщення складає  $S = 5 \cdot 4 = 20 \text{ м}^2$ , а об'єм  $V = 5 \cdot 4 \cdot 3 = 60 \text{ м}^3$ . Під час досліджень у кімнаті працює 1 людина, звідки отримуємо, що площа на одного чоловіка складає  $S_{\text{ч}} = 20 \text{ м}^2/\text{чол.}$ , а об'єм –  $V_{\text{ч}} = 60 \text{ м}^3/\text{чол.}$  План приміщення представлений на рисунку 4.1.



1 – робочий стіл; 2 – шафа; 3 – ліжка; 4 – вікно; 5 – двері

Рисунок 5.1 – План робочої кімнати

### 4.3 Виробниче освітлення на робочих місцях користувачів ВДТ

Для забезпечення комфортних та безпечних умов праці користувачів ВДТ, праця яких характеризується значним напруженням зорової роботи, необхідно, в

першу чергу, забезпечити раціональне освітлення виробничих приміщень та робочих місць з ВДТ та виключити можливість виникнення умов, за яких має місце зоровий дискомфорт в їх роботі [30]. Зоровий дискомфорт у користувачів ВДТ може бути, наприклад, при неправильній орієнтації робочого місця відносно світлових віконних отворів, при неправильному розташуванні світильників відносно робочих місць, коли вони знаходяться в полі зору користувача ВДТ і створюють засліплюючу дію (пряма блискість), також в разі засліплюючої дії предметів з високою яскравістю, які знаходяться за спиною користувача і при дзеркальному відбитті на екрані дисплею ВДТ попадають в поле його зору (відбита блискість), а також при неправильному розподілі яскравості безпосередньо на екрані самого дисплею ВДТ.

Для створення комфортних умов зорової роботи користувачів ВДТ виробниче освітлення повинно відповідати наступним вимогам:

забезпечувати на робочих місцях рівень освітлення, який би відповідав розряду зорової роботи згідно встановлених норм;

виключати на робочих місцях користувачів ВДТ можливість засліплення від джерел природного та штучного освітлення;

забезпечувати достатню рівномірність та постійність рівня освітленості;

не створювати на робочому місці різких та глибоких тіней;

обмежувати до мінімуму пульсацію світлового потоку;

не зменшувати контраст об'єктів розрізнення з фоном на екрані дисплею ВДТ.

Природне освітлення повинно бути боковим, бажано однобічним. В цьому випадку природне світло буде проникати в приміщення через бокові світлові віконні прорізи. Для уникнення засліплюючої дії сонячних променів найкраще, коли світлові віконні прорізи зорієнтовані на північ чи північний схід [31].

#### **4.4 Санітарно-гігієнічні вимоги до умов праці на комп'ютеризованих робочих місцях**

Санітарно-гігієнічне нормування параметрів виробничого середовища на комп'ютеризованих робочих місцях здійснюється згідно з НПАОП 0.00-7.15-18 «Правила охорони праці під час експлуатації електроннообчислювальних машин» [32], Вимог щодо безпеки та захисту здоров'я працівників під час роботи з екранними пристроями, затверджених наказом Міністерства соціальної політики України № 207 від 14 лютого 2018 р. та ДСанПіН 3.3.2.007-98 з урахуванням положень міжнародних нормативноправових актів з цих питань (директиви Ради Європейського союзу 90/270/ЄЕС, 89/391/ЄЕС, 89/654/ЄЕС, 89/655/ЄЕС, стандарти ISO, MPRII). Умови праці осіб, які постійно працюють з комп'ютерною технікою, згідно з НПАОП 0.00-7.15-18 відповідають I класу відповідно до Гігієнічної класифікація праці за показниками шкідливості та небезпечності факторів виробничого середовища, важкості та напруженості трудового процесу

#### **4.5 Розміщення устаткування та організації робочих місць користувачів ВДТ**

Правильна організація робочих місць користувачів ВДТ сприяє як підвищенню їх працездатності та продуктивності праці, так і зменшенню їх втомлюваності. Проведені дослідження показують, що при раціональній організації робочих місць продуктивність праці зростає в середньому на 15-25% [33]. У першу чергу, організація робочого місця користувача ВДТ передбачає правильне розміщення робочого місця у виробничому приміщенні, його відповідність ергономічним вимогам та вимогам технічної естетики, а також раціональне компонування обладнання на робочих місцях. Основні вимоги до організації робочого місця користувача ВДТ наведено в НПАОП 0.00-7.15-18 та ДСанПіН 3.3.2.007-98, Згідно яких робоче місце відповідає нормам. На рисунку 4.2 зображено положення оператора на робочому місці.

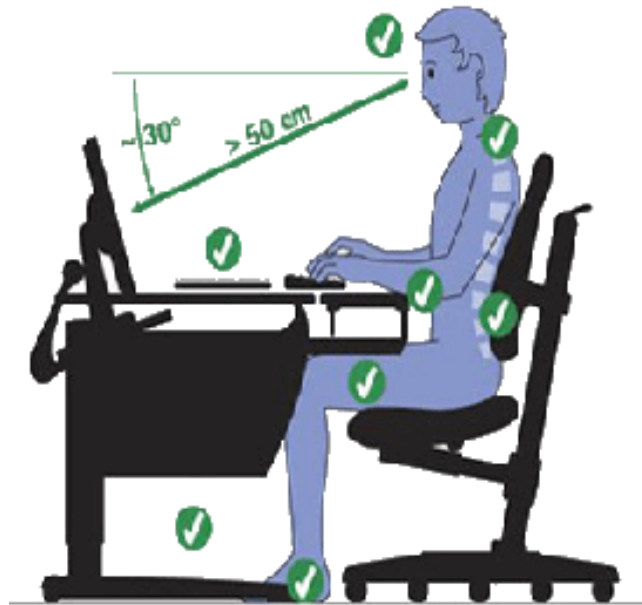


Рисунок 4.2 – Положення оператора за комп'ютером

#### 4.6 Організація режиму праці та відпочинку користувачів ВДТ

За характером трудової діяльності при роботі з ВДТ виділено три професійні групи згідно з діючим класифікатором професій (ДК-003-95 і Зміна № 1 до ДК-003-95) [34]: Відповідно до вище наведеної класифікації ДСанПіН 3.3.2-007-98 встановлюються такі внутрішньозмінні режими праці та відпочинку при роботі з ЕОМ при 8-годинній денній робочій зміні в залежності від характеру праці [34]:

для розробників програм із застосуванням ЕОМ слід призначати регламентовану перерву для відпочинку тривалістю 15 хвилин через кожен годину роботи за ВДТ;

для операторів із застосуванням ЕОМ слід призначати регламентовані перерви для відпочинку тривалістю 15 хвилин через кожні дві години роботи;

для операторів комп'ютерного набору слід призначати регламентовані перерви для відпочинку тривалістю 10 хвилин після кожної години роботи за ВДТ.

У нашому випадку для операторів комп'ютерного набору призначаються регламентовані перерви для відпочинку тривалістю 10 хвилин після кожної години роботи.

## **5 ОРГАНІЗАЦІЙНО-ЕКОНОМІЧНИЙ РОЗДІЛ**

### **5.1 Науково-технічна актуальність теми дослідження**

Сучасні нанотехнології дозволяють отримувати нанорозмірні об'єкти, які не містять дислокацій. У зв'язку з чим виникає питання який механізм переходу від пружних до пластичних деформацій в нанорозмірних кристалах і, відповідно, в чому полягає фізична природа масштабного ефекту в цих об'єктах.

На сьогодні матеріали з W е не тільки одними з найміцніших, а й широко використовуються у нанотехнологіях, вони використовуються як контилівери у атомних-силових мікроскопах, джерела іонів в вакуумній електроніці та іншому. Тому вольфрам є перспективним у дослідженнях в нано розмірі.

Метод молекулярної динаміки є єдиним інструментом який дозволяє отримати кількісну інформацію про міцність, руйнування, деформації відносно звичайного експерименту який дає лише обмежену інформацію. Кількісна інформація здатна дати нам набагато більше важливої інформації, яку просто неможливо визначити під час експерименту.

### **5.2 Розрахунок витрат на проведення НДР**

Розрахунок усіх витрат організації-виконавця НДР, пов'язаних з виконанням теми, дає можливість встановити її собівартість або кошторисну вартість. Кошторис розробляє виконавець робіт на основі календарного плану проведення досліджень і затверджує замовник або орган, що забезпечує фінансування робіт. Як правило, кошторис складається до початку виконання робіт і тому називається плановим.

Методичні поради щодо встановлення величини витрат на проведення робіт по темі в розрізі типових статей кошторисної вартості (калькуляції собівартості) НДР наводяться нижче.

### 5.2.1 Витрати на оплату праці

Витрати за цією статтею включають заробітну плату безпосередніх виконавців теми, а заробітна плата адміністративно-управлінського персоналу, працівників дослідних виробництв включаються в кошторисну вартість теми через статтю «Накладні витрати». Крім цього, слід враховувати, що для тем, які фінансуються за рахунок держбюджету прибуток не планується і тому в дану статтю витрат включається тільки основна заробітна плата (без премій та інших виплат, що здійснюються із прибутку).

Витрати на оплату праці розраховують на основі даних про трудомісткість окремих робіт по темі (табл. 5.1) та посадових окладів безпосередніх їх виконавців (табл. 5.2).

Загальна трудомісткість робіт, що виконуються безпосередньо студентом (інженером-дослідником), визначається навчальним планом відповідного напрямку підготовки.

Таблиця 5.1 – Трудомісткість робіт по темі

Найменування робіт по темі дослідження	Трудомісткість за виконавцями, людино-днів	
	Професор	Інженер-дослідник
1	2	3
Ознайомлення з літературою та програмою для моделювання	8	15
Проведення моделювання	6	13
Написання записки	10	22
Оформлення, перевірка та захист	5	10
Разом за виконавцями теми	29	60

Подальші розрахунки витрат на оплату праці проводяться за алгоритмом, зрозумілим із таблиці 5.2.

Середньоденна заробітна плата за категоріями виконавців розраховується шляхом ділення їх посадового місячного окладу на 21,2 (де 21,2 – усереднене число робочих днів за місяць).

Таблиця 5.2 – Розрахунок витрат на оплату праці

Посада виконавців теми	Планова трудомісткість, люд-днів	Заробітна плата, грн		
		Посадовий місячний оклад	Середньоденна зарплата	Усього за виконавцями
Професор	29	19438	916,88	26589,72
Інженер-дослідник	60	6000	283,02	16981,13
Разом оплата праці з теми				43570,85

### 5.2.2 Єдиний соціальний внесок

Єдиний соціальний внесок (ЄСВ) – це обов’язкове відрахування на загальнодержавне соціальне страхування. З 1 січня 2016 р. ставка ЄСВ складає 22%. Базою для нарахування ЄСВ слугують загальні витрати на оплату праці по темі (підсумок по таблиці 5.2).

$$ЄСВ = ЗП \cdot 0,22, \quad (5.1)$$

де ЗП – загальні витрати на оплату праці по темі.

Наразі ЄСВ буде становити:

$$CCB = 43570,85 \cdot 0,22 = 9585,59 \text{ грн.}$$

### **5.2.3 Матеріали, необхідні для проведення досліджень**

В роботі проводилось моделювання на комп'ютері з використанням програмного забезпечення LAMMPS. Досліджень у лабораторії не проводилось, відповідно, витрати на матеріали відсутні.

### **5.2.4 Енергоносії для проведення досліджень**

Всі роботи проводились безпосередньо на комп'ютері, тому витрати на енергоносії не передбачені.

### **5.2.5 Витрати на спеціальне обладнання**

В роботі використовуються вже існуюче обладнання: комп'ютер. Спеціальне устаткування для виконання НДР не закуповувалось.

### **5.2.6. Вартість послуг сторонніх організацій**

Дана робота не потребувала оренди дослідницьких установок, адже всі вони були в наявності. Моделювання проводилося безпосередньо на комп'ютері, тому витрати на послуги сторонніх організацій не передбачені.

### **5.2.7 Витрати на службові відрядження**

Всі роботи проводились безпосередньо на комп'ютері, тому витрати на відрядження не передбачені.

### 5.2.8 Інші прямі невраховані витрати

У цій статті поєднуються всі витрати на проведення НДР, що не увійшли до попередніх статей. При проведенні роботи інші прямі витрати приймаємо на рівні 10 % від суми врахованих витрати на виконання НДР.

$$I_g = (ЗП + ЄСВ) \cdot 0,1 ,$$

Наразі  $I_g$  буде становити:

$$I_g = (43570,85 + 9585,59) \cdot 0,1 = 5315,64 \text{ грн.}$$

### 5.2.9 Накладні витрати

Накладні витрати включаються до калькуляції кошторисної вартості теми пропорційно обсягам витрат на оплату праці основних виконавців або пропорційно сумі прямих витрат на виконання теми досліджень по нормативам організації-виконавця цього дослідження.

Ця стаття включає витрати, пов'язані з управлінням організацією-виконавцем теми, витрати на винахідництво і раціоналізацію; витрати на амортизацію основних засобів; витрати на науково-технічну інформацію; витрати на забезпечення нормальних умов праці і техніки безпеки; витрати на оплату послуг банків; податки, збори та інші обов'язкові платежі і витрати тощо.

Розглянемо варіант розрахунку накладних витрат пропорційно сумі прямих витрат на рівні 20 %.

$$H_g = (ЗП + ЄСВ + I_g) \cdot 0,2 , \quad (5.2)$$

Наразі  $H_g$  буде становити:

$$H_g = (43570,85 + 9585,59 + 5315,64) \cdot 0,2 = 11694,42 \text{ грн.}$$

### 5.2.10 Розроблення планової калькуляції кошторисної вартості теми

Планова калькуляція вартості проведення досліджень по темі складається на підставі виконаних розрахунків та нормативних даних (табл.4.3).

Таблиця 5.3 – Планова калькуляція кошторисної вартості НДР

Найменування статей витрат	Сума, грн	Обґрунтування
1	2	3
1.Витрати на оплату праці	43570,85	Відповідно до розрахунків
2.Єдиний соціальний внесок	9585,59	22,0 % від загальних витрат на оплату праці
3.Матеріали для проведення досліджень	–	Відповідно до розрахунків (у нашому випадку не передбачено)
4.Енергоносії для проведення досліджень	–	Відповідно до розрахунків (у нашому випадку включаються у статтю накладні витрати)
5.Спецобладнання для наукових цілей	–	Відповідно до розрахунків (у нашому випадку включаються у статтю накладні витрати)
6.Вартість послуг сторонніх організацій	–	За договором із сторонніми організаціями (у нашому випадку включаються у статтю накладні витрати)
7.Витрати на службові відрядження	–	Відповідно до розрахунків (у нашому випадку не передбачено)
8.Інші невраховані прямі витрати по темі	5315,64	10 % від суми прямих розрахованих витрат по темі
9.Накладні витрати	11694,42	Відповідно до нормативів організації-виконавця теми (у нашому випадку 20% від суми прямих витрат)
10.Усього витрат по темі	70166,50	Сума попередніх статей

### 5.3 Науково-технічна ефективність НДР

Розрахунок очікуваного економічного ефекту НДР необхідно для визначення доцільності проведення даної роботи. Проте він може бути розрахований лише по НДР, які безпосередньо спрямовані на створення нових матеріалів, покращення параметрів якості продукції, а також створення нових конструкцій.

Для визначення річного економічного ефекту скористаємося бальною системою оцінювання економічної ефективності за наступними показниками:

- важливість розробки ( $K_1$ );
- можливість використання результатів розробки ( $K_2$ );
- теоретичне значення та рівень новизни ( $K_3$ );
- складність дослідження ( $K_4$ ).

Коефіцієнт  $K_1$  може приймати наступні значення:

- а) ініціативна робота, яка не входить до складу комплексної програми та не є завданням директивних органів – 1 бал;
- б) робота виконується за угодою про науково-технічне співробітництво – 3 бали;
- в) робота являє собою частину відомчої програми – 5 балів;
- г) робота являє собою частину комплексної міжвідомчої програми з елементами впровадження результатів – 7 балів;
- д) робота є частиною міжнародної комплексної програми – 8 балів.

Коефіцієнт  $K_2$  може приймати такі значення:

- а) результати розробки можна використати тільки в даному підрозділі – 1 бал;
- б) результати розробки можуть бути використані тільки однією організацією – 3 бали;

в) результати розробки можуть бути використані декількома організаціями – 5 балів.

г) результатами розробки можуть користуватися в масштабах однієї галузі – 8 балів;

д) результатами розробки можуть користуватися у різних галузях – 10 балів.

Коефіцієнт  $K_3$  може приймати такі значення:

а) робота являє собою аналіз, узагальнення або класифікацію відомої інформації, подібні результати раніше були відомі в досліджуваній галузі – 2 бали;

б) під час виконання роботи отримана нова інформація, яка доповнює уявлення про сутність досліджуваних процесів – 3 бали;

в) внаслідок виконання роботи отримана нова інформація, яка частково змінює уявлення про природу досліджуваних процесів – 5 балів;

г) внаслідок виконання НДР створені нові теорії, методики тощо – 6 балів;

д) отримана інформація формує принципово нові уявлення, які не були відомі раніше – 8 балів.

Коефіцієнт  $K_4$  може приймати такі значення:

а) роботу виконує один підрозділ, витрати до 10 000 гривень – 1 бал;

б) роботу виконує один підрозділ, витрати від 10 000 до 50 000 гривень – 3 бали;

в) роботу виконує один підрозділ, витрати від 50 000 до 100 000 гривень – 5 балів;

г) робота виконується декількома підрозділами, витрати від 100 000 до 200 000 гривень – 7 балів;

д) робота виконується декількома організаціями, витрати понад 200 000 гривень – 9 балів.

Загальна бальна оцінка (Б) вираховується перемноженням коефіцієнтів.

$$B = K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 \cdot K_4$$

В нашому випадку бальна оцінка ефективності згідно таблиці 5.4 становить:

$$B = 3 \cdot 8 \cdot 3 \cdot 5 = 360$$

Таблиця 5.4 – Бальна оцінка ефективності НДР

Показник оцінки ефективності НДР	Умовне позначення показника	Характеристики даної роботи	Кількість балів
Важливість розробки	$K_1$	Робота виконується за угодою про науково-технічне співробітництво	3
Можливість використання результатів розробки	$K_2$	результатами розробки можуть користуватися в масштабах однієї галузі	8
Теоретична значимість та рівень новизни розробки	$K_3$	Під час виконання роботи отримана нова інформація, яка доповнює уявлення про сутність досліджуваних процесів	3
Складність дослідження	$K_4$	Роботу виконує один підрозділ, витрати від 50 000 до 100 000 гривень	5

Умовний ефект НДР розраховується за формулою:

$$E_{НДР}^y = 500 \cdot B - E_n \cdot B_{НДР} ,$$

де 500 – умовна вартість одного балу;

$E_n$  – нормативний коефіцієнт економічної ефективності (може бути в межах 0,1 – 0,3);

$B_{НДР}$  – сумарні витрати на виконання НДР (підсумок табл. 4.3);

У нашому прикладі умовний ефект виконання НДР буде становити:

$$E_{НДР} = 500 \cdot 360 - 0,2 \cdot 70166,50 = 165966,7 \text{ грн.}$$

Економічна ефективність НДР визначається коефіцієнтом умовної економічної ефективності  $E_e$ . Він є відношенням умовного ефекту виконання НДР до сумарних витрат на виконання НДР та розраховується за формулою:

$$E_e = \frac{E_{НДР}}{B_{НДР}}. \quad (5.3)$$

У нашому прикладі  $E_e$  буде становити:

$$E_e = \frac{165966,7}{70166,50} = 2,365$$

Коефіцієнт умовної економічної ефективності науково-дослідної роботи становить 2,365 (перевищує одиницю), що свідчить про доцільність її виконання.

## ВИСНОВКИ

Вплив діаметра нанодроту на величину дотичних напружень, обумовлених дією сил поверхневого натягу, є причиною розмірного ефекту для міцності нанодротів.

При розтягуванні нанодроту W в напрямках [110] і [111] спостерігається аномальний розмірний ефект, який полягає в зменшенні міцності при зменшенні діаметра нанодроту.

При розтягуванні нанодроту вольфраму у напрямках [110], [111] локальна нестабільність кристала пов'язана з утворенням дислокацій у поверхневому шарі, де дія сил поверхневого натягу призводить до збільшення рівня локальних дотичних напружень, зменшуючи, тим самим, рівень міцності нанодроту.

## CONCLUSIONS

1. The influence of the nanowire diameter on the magnitude of tangential stresses due to the action of surface tension forces is the cause of the dimensional effect on the strength of nanowires.
2. When stretching the nanowire  $W$  in the directions  $[110]$  and  $[111]$ , an anomalous dimensional effect is observed, which is to reduce the strength while reducing the diameter of the nanowire.
3. When stretching tungsten nanowire in the directions  $[110]$ ,  $[111]$  local instability of the crystal is associated with the formation of dislocations in the surface layer, where the action of surface tension forces increases the level of local tangential stresses, thereby reducing the strength of the nanowire.

## ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ

1. Ju-Young Kim. Tensile and compressive behavior of tungsten, molybdenum, tantalum and niobium at the nanoscale [Electronic source] / Ju-Young Kim, Dongchan Jang, Julia R. // *Acta Materialia*. – 2010. – Vol. 58. – № 7. – P. 2355–2363. – Mode of acces : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1359645409008647?via%3Dihub> – Title of the screen. – Date of review : 15.04.2021.
2. Effects of pre-strain on the compressive stress–strain response of Mo-alloy single-crystal micropillars [Electronic source] / H. Bei, S. Shim, G.M. Pharr, E.P. George. // *Acta Materialia*. – 2008. – Vol. 56. – № 17. – P. 4762–4770. – Mode of acces : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1359645408003996> – Title of the screen. – Date of review : 16.04.2021.
3. Size effect on strength and strain hardening of small-scale [1 1 1] nickel compression pillars [Electronic source] / C.P. Frick, B.G. Clark, S. Orso, A.S. Schneider, E. Arzt. // *Materials Science and Engineering: A*. – 2008. – Vol. 489. – № 1–2. – P. 319–329. – Mode of acces : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S092150930701996X?via%3Dihub> – Title of the screen. – Date of review : 18.04.2021.
4. Inherent tensile strength of molybdenum nanocrystals [Electronic source] / Anatoly P Shpak<sup>1</sup>, Sergiy O Kotrechko, Tatjana I Mazilova and Igor M Mikhailovskij. // *Science and Technology of Advanced Materials*. – 2009. – Vol. 10. – № 4. – Mode of acces : <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1088/1468-6996/10/4/045004> – Title of the screen. – Date of review : 20.04.2021.
5. Inherent strength of zirconium-based bulk metallic glass [Electronic source] / A.S. Bakai, A.P. Shpak , N. Wanderka [and all] // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2010. – Vol. 356. – № 25–27. – P. 1310-1314. – Mode of acces : <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1088/1468-6996/10/4/045004> – Title of the screen. – Date of review : 20.04.2021.

6. Влияние кристаллографической ориентации на закономерности размерного эффекта при растяжении нанопроволоки молибдена [Электронный ресурс] / С. А. Котречко, А. В. Овсянников, В. В. Лидич. // Металлофизика и новейшие технологии. – 2018. – Т. 40. – № 2. – С. 183–199. – Режим доступа : <https://mfint.imp.kiev.ua/en/abstract/v40/i02/0183.html> – Заголовок с экрана. – Дата просмотра : 23.04.2021.

7. Molecular dynamics simulations on size dependent tensile deformation behaviour of [110] oriented body centred cubic iron nanowires [Electronic source] / G. Sainath, B.K. Choudhary // Materials Science and Engineering: A. – 2015. – Vol. 640. – P. 98–105. – Mode of acces : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0921509315300290> – Title of the screen. – Date of review : 25.04.2021.

8. Molecular dynamics simulation of deformation mechanisms in body centered-cubic molybdenum nanowires [Electronic source] / PengWang, WuChou, AnminNie [and all] // Journal of Applied Physics. – 2011. – Vol. 110. – № 9. – Mode of acces : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.3660251> – Title of the screen. – Date of review : 25.04.2021

9. Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твердых тел [Текст]: Труды всероссийской конференции [«Математика, Механика и Информатика 2002»], посвященной 10-летию РФФИ / А.М. Кривцов, И.Б. Волковец, П.В. Ткачев, В.А. Цаплин. – Санкт-Петербург 2003. – 14 с.

10. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике [Текст] / Д. В. Хеерман // Перевод с англ. В. Н. Задкова; под ред. С. А. Ахманова. – Москва : Наука, 1990. - 175 с.

11. Gear C.W. Numerical initial value problems in ordinary differential equations [Text] / Gear C.W. – United States: Prentice-Hall, 1971. – 253 p.

12. Atomistic viewpoint of the applicability of microcontinuum theories [Electronic source] / Youping Chen, James D. Lee, Azim Eskandarian // International Journal of Solids and Structures. – 2004. – Vol. 41. – № 8. – P. 2085–2097. – Mode of

access : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0020768303006796> –

Title of the screen. – Date of review : 2.05.2021.

13. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твёрдого тела : учеб. пособие для вузов [Текст] / Работнов Ю.Н. – 2е изд., испр. – Москва : Наука, 1988. – 712 с.

14. Покропивный В.В. Компьютерное моделирование атомных механизмов эволюции границ раздела в процессах трибо взаимодействия и компактирования металлических наночастиц [Текст] : дис. ... докт. физ.-мат. наук: 01.04.07. / В.В. Покропивный – Киев, 1998. – 294 с.

15. Murray S. Daw. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals [Electronic source] / Murray S. Daw, M. I. Baskes // Physical Review B. – 1985. – Vol. 29. – № 12–15. – P. 6443. – Mode of access : <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.29.6443> – Title of the screen. – Date of review : 7.05.2021.

16. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron [Electronic source] / M. I. Mendeleev, S.Han, D. J. Srolovitz [and all] // Philosophical Magazine. – 2003. – Vol. 83. – № 35. – P. 3977–3994. – Mode of access : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0927025605002600> – Title of the screen. – Date of review : 8.05.2021.

17. Atomistic simulation of the influence of pressure on dislocation nucleation in bcc [Electronic source] / Mo Xu D.S., Yang R., Li J. [and all] // Computational Materials Science. – 2006. – Vol. 36. – № 1–2. – P. 60–64. – Mode of access : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0927025605002600> – Title of the screen. – Date of review : 8.05.2021.

18. Гусак А.М. Статистична фізика – основні положення та моделі: Навч. посібник. [Текст] / Гусак А.М., Гриценко В.Г., Запорожець Т.В. – Черкаси : ЧДУ, 1998 – 288 с.

19. Atomistic simulations of deformation and fracture of  $\alpha$ -Fe [Electronic source] / S. Y. Hu, M. Ludwig, P. Kizler and S. Schmauder // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 1998. – Vol. 6. – № 5. – P. 567–

586. – Mode of acces : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0965-0393/6/5/005/meta> – Title of the screen. – Date of review : 8.05.2021.

20. An improved N-body semi-empirical model for body-centred cubic transition metals [Electronic source] / G. J. Ackland, R. Thetford. // Philosophical Magazine A. – 1987. – Vol. 56. – № 1. – P. 15–30. – Mode of acces : <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/01418618708204464> – Title of the screen. – Date of review : 10.05.2021.

21. Interatomic Potentials Repository: W [Electronic source] // National Institute of Standards and Technology [official website]. – Electronic data. – [2010]. – Mode of acces : <https://www.ctcms.nist.gov/potentials/system/W/> – Title of the screen. – Date of review : 12.05.2021.

22. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten [Electronic source] / M-C Marinica, Lisa Ventelon, M R Gilbert [and all] // Journal of Physics: Condensed Matter. . – 2013. – Vol. 25. – № 39. – P. 395502. – Mode of acces : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/25/39/395502/meta> – Title of the screen. – Date of review : 15.05.2021.

23. Graphene-coated tungsten nanowires deliver unprecedented modulus and strength [Electronic source] / Zhong-Wei Hu, Min Wang, Chao-Wei Guo [and all] // Materials Research Letters. – 2019. – Vol. 7. – № 2. – P. 47–52. – Mode of acces : <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/21663831.2018.1553801> – Title of the screen. – Date of review : 15.05.2021.

24. Особливості розмірного ефекту при деформації металевих ОЦК-нанокристалів у напрямку <<110>> [Електронне джерело] / С. О. Котречко, О. В. Овсянніков, В. В. Лідич // Металлофізика и новейшие технологии. – 2012. – Т. 34. – №11. – С. 1517–1527. - Режим доступу: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0927025605002600> - Заголовок з екрану. - Дата перегляду: 20.05.2021.

25. Orientation dependent deformation behaviour of BCC iron nanowires [Electronic source] / G. Sainath , B. K. Choudhary // Computational Materials Science. – 2016. – Vol. 111. – P. 406–415. – Mode of acces :

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0927025615006369> – Title of the screen. – Date of review : 20.05.2021.

26. Концепция механической стабильности конструкционных сталей [Электронный ресурс] / С.А. Котречко, Ю.Я. Мешков // Проблемы прочности. — 2009. — № 2. — С. 55–78. — Режим доступа : <http://dspace.nbuu.gov.ua/handle/123456789/48380> – Заголовок с экрана. – Дата просмотра : 24.05.2021.

27. Atomistic simulations of the yielding of gold nanowires [Electronic source] / J. K. Diao, K. Gall, M. L. Dunn, J. A. Zimmerman // Acta Materialia. – 2006. – Vol. 54. – № 3. – P. 643–653. – Mode of acces : <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1359645405005884> – Title of the screen. – Date of review : 25.05.2021.

28. Охорона праці та цивільний захист [Текст] : навч. посіб. / О.Г. Левченко, О.І. Полукаров, В.В. Зацарний [та інші] : [За ред. О.Г. Левченка]. – Київ : Основа, 2019. – 472 с.

29. Про охорону праці [Електронний ресурс] : Закон України від 14.10.1992 р. № 2695-ХІІ. – Електронні текстові дані. – Режим доступу: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/2694-12#Text> – Заголовок з екрану. – Дата перегляду: 5.05.2021

30. Охорона праці та цивільний захист [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальностей 132 «Матеріалознавство» та 136 «Металургія» / О.Г. Левченко ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 26,1 Кбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 337 с.

31. Державні будівельні норми України. Природне і штучне освітлення [Текст] : ДБН В 2.5-28-2006. – Чинний з 2006-06-15. – Київ : Мінбуд України, 2006. – 76 с.

32. Державні Нормативні Акти з Охорони Праці. Організації робочого місця користувача ВДТ [Текст] : НПАОП 0.00-7.15-18. – Чинний з 2018-02-14. – Київ : Держстандарт України, 2018.

33. Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними

терміналами електронно-обчислювальних машин. Гігієнічні вимоги до організації роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин [Текст] : ДСанПіН 3.3.2.007-98 – Чинний з 1998-12-10. – Київ : Держстандарт України, 1998.

34. Державний класифікатор України. Класифікатор професій [Текст] : ДК–003-95. – Чинний з 1996-01-01. – Київ : Держстандарт України, 1996.