

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

**Інженерно-фізичний факультет**

**Кафедра фізики металів**

«На правах рукопису»  
УДК 538.931

«До захисту допущено»

В.о. завідувача кафедри

\_\_\_\_\_ Є. В. Іващенко

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**Магістерська дисертація**

**на здобуття ступеня магістра**

**зі спеціальності 132 Матеріалознавство**

**на тему: «Вплив швидкості руху крайових дислокацій на взаємодію з  
міжвузельними атомами в металах з кубічною ґраткою»**

Виконала:

студентка VI курсу, групи ФМ-61м  
Солдатенко Оксана Михайлівна \_\_\_\_\_

Керівник:

К. т. н., доцент  
Іващенко Є. В. \_\_\_\_\_

Науковий консультант:

Д. ф.-м. н., доцент  
Філатов О. В. \_\_\_\_\_

Консультант з охорони праці та безпеки в надзвичайних ситуаціях:

К. т. н., доцент  
Зацарний В. В. \_\_\_\_\_

Консультант з нормоконтролю:

Асистент кафедри ФМ  
Шаповалова Н. А. \_\_\_\_\_

Рецензент:

К. т. н., доцент кафедри МТО  
Доній О. М. \_\_\_\_\_

Засвідчую, що у цій магістерській  
дисертації немає запозичень з праць  
інших авторів без відповідних  
посилань.

Студентка \_\_\_\_\_

Київ – 2018 року

**Національний технічний університет України**  
**«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**

**Інженерно-фізичний факультет**

**Кафедра фізики металів**

Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-науковою програмою

Спеціальність (спеціалізація) – 132 «Матеріалознавство» («Фізичне матеріалознавство»)

ЗАТВЕРДЖУЮ

В. о. завідувача кафедри

\_\_\_\_\_ Є. В. Іващенко

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**ЗАВДАННЯ**

**на магістерську дисертацію студенту**

**Солдатенко Оксані Михайлівні**

1. Тема дисертації «Вплив швидкості руху крайових дислокацій на взаємодію з міжвузельними атомами в металах з кубічною граткою», науковий керівник дисертації Іващенко Євген Вадимович, к. т. н., доцент, затверджені наказом по університету від «22» 03 2018 р. № 994-с
2. Термін подання студентом дисертації \_\_\_\_\_
3. Об'єкт дослідження: чистий метал з об'ємцентрованою кубічною граткою.
4. Предмет дослідження: крайові дислокації, що рухаються під впливом імпульсного навантаження та їх взаємодія з точковими дефектами.
5. Перелік завдань, які потрібно розробити: 1 – проаналізувати літературні дані досліджень за даною тематикою; 2 – створити тривимірну молекулярно-динамічну модель, яка підходить для дослідження руху дислокацій і їх взаємодії з міжвузельними атомами; 3 – на основі моделі дослідити взаємодію дислокацій з власним міжвузельним атомом; 4 – розрахувати коефіцієнти масоперенесення та з'ясувати внесок рухомих дислокацій в процеси масоперенесення під дією імпульсних навантажень.
6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу: слайди презентації – тема роботи (1 слайд), актуальність та мета дослідження

(      слайди), матеріали та методика (      слайди), результати (      слайди), висновки (      слайд).

## 7. Орієнтовний перелік публікацій:

1) Filatov O. The determination of temperature stability of silver nanotubes by the molecular dynamics simulation / O. Filatov, S. Soldatenko, O. Soldatenko // Applied Nanoscience – 2018. – P. 1–5. <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0770-4>.

2) Солдатенко О. М. Вплив температури та швидкості руху крайових дислокацій на коефіцієнт самодифузії в залізі / О. М. Солдатенко, О. В. Філатов // Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп'ютерного конструювання матеріалів: XI міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. Збірка тез доповідей. – Київ, 2018. – С. 162–163.

3) Filatov O. V. The alteration of structure of silver nanotube in the process of heating / O. V. Filatov, S. M. Soldatenko, O. M. Soldatenko // Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2017): International research and practice conference. Abstract book. – Chernivtsi, 2017. – С. 302–303.

4) Губіна О. М. Зміна структури срібної нанотрубки в процесі її нагріву / О. М. Губіна, С. М. Солдатенко // Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп'ютерного конструювання матеріалів: X міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. Збірка тез доповідей. – Київ, 2017. – С. 285–286.

5) Солдатенко С. М. Вплив температури на коефіцієнт лінійного термічного розширення срібної нанотрубки / С. М. Солдатенко, О. М. Губіна // Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп'ютерного конструювання матеріалів: X міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. Збірка тез доповідей. – Київ, 2017. – С. 283–284.

6) Biocompatible coatings made from hydroxyapatite, reinforced using carbon nanotubes / S. I. Sidorenko, Ie. V. Ivashchenko, G. G. Lobachova, V. I. Panarin, M. Ie. Svavilny, O. M. Hubina, V. V. Yanchuk // E-MRS 2017 Fall Meeting. – Warsaw, 2017.

## 8. Консультанти розділів дисертації

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Наукова частина	д. ф.-м. н., доцент Філатов О. В.		
Охорона праці та безпека в надзвичайних ситуаціях	к. т. н., доцент Зацарний В. В.		
Нормоконтроль	ас. Шаповалова Н. А.		

9. Дата видачі завдання \_\_\_\_\_

### Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Видача завдання		
2	Аналіз літературних даних та написання літературного огляду		
3	Визначення методики дослідження		
4	Проведення розрахунків		
5	Аналіз результатів дослідження		
6	Оформлення роботи		
7	Оформлення презентації		
8	Захист на засіданні ЕК		

Студент

О. М. Солдатенко

Науковий керівник дисертації

Є. В. Іващенко

## РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація: 88 сторінок, 17 рисунків, 13 таблиць, 1 додаток, 67 джерел посилання.

### ДИСЛОКАЦІЯ, ДИФУЗІЯ, КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, МІЖВУЗЕЛЬНИЙ АТОМ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА

Об'єкт дослідження – чистий метал з об'ємоцентрованою кубічною граткою.

Мета роботи – дослідити взаємодію рухомої дислокації з власним міжвузельним атомом в кристалі з об'ємоцентрованою кубічною граткою за допомогою методу молекулярної динаміки.

Методи дослідження – комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки, структурні дослідження за допомогою програмного забезпечення VMD.

Створено тривимірну молекулярно-динамічну модель, яка дозволяє на атомному рівні досліджувати рух дислокацій та їх взаємодію з точковими дефектами.

На основі отриманої моделі досліджено взаємодію дислокації, що рухається під дією зовнішнього навантження, з власним міжвузельним атомом.

Встановлено, що дислокація є рухомою пасткою для міжвузельних атомів.

Досліджено залежність коефіцієнта самодифузії в залізі від температури та швидкості деформації та встановлено, що при великих швидкостях деформації, вплив температури на процеси масопереносу виражений в значно меншій мірі, ніж вплив швидкості деформації.

## ABSTRACT

Master`s dissertation: 88 pages, 17 figures, 13 tables, 1 appendix, 67 references.

DILOCATION, DIFFUSION, COMPUTER MODELLING,  
INTERSTITIAL ATOM, MOLECULAR DYNAMICS

Research object – pure metal with a body centered cubic lattice.

Aim – to investigate the interaction of a moving dislocation with an interstitial atom in a crystal with a body centered cubic lattice by the molecular dynamics method.

Research methods – a computer simulation by the molecular dynamics method, structural research using VMD software.

There was created a three-dimensional molecular-dynamic model, which allows to investigate the motion of dislocations and their interaction with point defects at the atomic level.

The interaction of the dislocation that moves under the influence of external load with the interstitial atom is investigated on the basis of the obtained model.

It is established that the dislocation is a moving trap for interstitial atoms.

The dependence of the self-diffusion coefficient in iron on the temperature and velocity of deformation has been investigated. It has been established that a velocity of deformation much more influences on the mass transfer processes than a temperature.

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	10
ВСТУП .....	11
1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД .....	12
1.1 Геометрія крайових дислокацій.....	12
1.2 Взаємодія дислокацій з точковими дефектами.....	15
1.3 Дифузія за механізмом випадкових блукань.....	18
1.4 «Дислокаційна дифузія».....	20
1.5 Утворення дефектів при імпульсному впливі.....	21
1.6 Масоперенос при імпульсному впливі .....	23
1.7 Комп'ютерне моделювання дефектів та дифузійних процесів у металах .....	24
1.7.1 Атомістичне моделювання.....	26
1.7.2 Основи методу молекулярної динаміки.....	28
1.7.3 Моделювання дислокацій, точкових дефектів та процесів масоперенесення в металах .....	34
2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ .....	36
2.1 Матеріали для комп'ютерного моделювання .....	36
2.2 Методика побудови крайової дислокації та міжвузельного атому .....	36
2.3 Вибір потенціалу взаємодії .....	37
2.4 Визначення кроку по часу .....	39
2.5 Вибір граничних умов та методика моделювання пластичної деформації.....	40
2.6 Візуалізація результатів моделювання .....	42
2.7 Методика розрахунку параметрів масоперенесення .....	43

3 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ.....	44
3.1 Рух дислокацій в металах з ОЦК граткою.....	44
3.2 Взаємодія міжвузельного атому з рухомими дислокаціями .....	46
3.3 Вплив швидкості деформації та температури на швидкість руху дислокацій.....	47
3.4 Розрахунок параметрів масоперенесення.....	49
3.4.1 Вплив температури на коефіцієнт самодифузії .....	50
3.4.2 Вплив швидкості деформації на масоперенесення.....	52
4 РОЗРОБЛЕННЯ СТАРТАП-ПРОЕКТУ .....	55
4.1 Опис ідеї проекту .....	55
4.2 Аналіз переваг ідеї проекту.....	55
4.3 Визначення потенційних груп клієнтів .....	57
4.4 SWOT-аналіз.....	57
4.5 Формування маркетингової концепції товару .....	58
5 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ .....	60
5.1 Аналіз параметрів приміщення та мікроклімату .....	61
5.2 Аналіз освітленості приміщення .....	63
5.2.1 Розрахунок природного освітлення .....	64
5.2.2 Розрахунок штучного освітлення.....	67
5.3 Виробничі випромінювання.....	69
5.3.1 Випромінювання від комп'ютера.....	69
5.4 Виявлення та аналіз наявності шуму, вібрації, інфра- та ультразвуку..	69
5.5 Електробезпека.....	70
5.5.1 Розрахунок заземлення.....	71
5.6 Забезпечення безпеки та запобігання надзвичайним ситуаціям.....	73



ВИСНОВКИ.....	76
CONCLUSIONS.....	77
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ .....	78
ДОДАТОК А      Вихідний код для моделювання системи з дислокаціями та міжвузельним атомом в програмі XMD.....	85

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

МД – молекулярна динаміка;

ОЦК – об'ємоцентрована кубічна ґратка;

МА – міжвузельний атом;

ПГУ – періодичні граничні умови;

ЖГУ – жорсткі граничні умови.

## ВСТУП

Як відомо, в кристалічних твердих тілах атоми здійснюють теплові коливання відносно свого положення рівноваги, однак, завдяки їх високій рухливості, в певний момент часу, вони можуть переходити з одного вузла кристалічної ґратки в інший – такий процес називається дифузією.

Основою дифузійних процесів є атомні переміщення, які суттєво залежать від структури кристалу, особливо, від наявних у ньому дефектів. В свою чергу, дефекти кристалічної будови можуть як полегшувати атомні переміщення, так і ускладнювати їх.

Одним із дефектів кристалічної будови є дислокація – це лінійний дефект, який є результатом трансляції або лінійного зміщення однієї частини кристалу відносно іншої. Дислокація являє собою атомну екстраплощину, втілену в кристалічну будову матеріалу, яка формує в кристалі центри стиску та розтягу – так зване ядро дислокації.

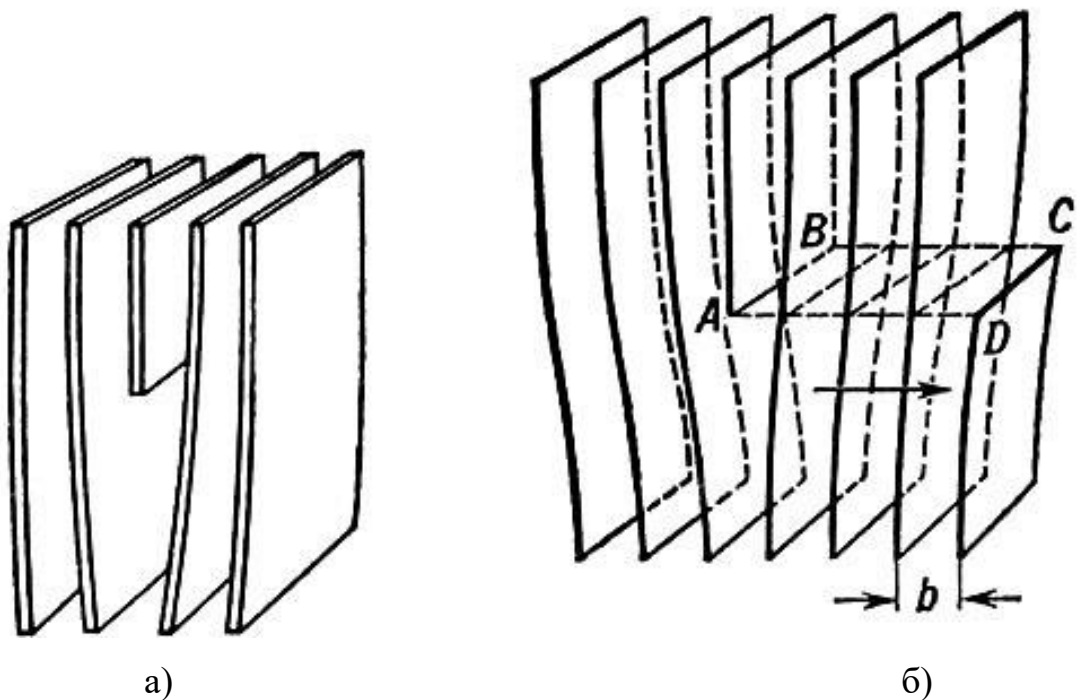
Існує теорія, що ядро дислокацій є центром стоку для точкових дефектів. До того ж, в області ядра дислокацій рухливість атомів може бути на порядок вищою. Актуальним на сьогодні також є питання про те, як саме точкові дефекти поведуть себе в ядрі дислокацій.

В даній роботі ми спробуємо дослідити, як взаємодіє крайова дислокація в об'ємоцентрованій кубічній ґратці з власним міжвузельним атомом, та як змінюється швидкість руху дислокацій і рухливість атомів у кристалі в залежності від температури і швидкості деформації зразка.

## 1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

### 1.1 Геометрія крайових дислокацій

Утворення дислокацій або їх введення в кристалічну ґратку можна описати за допомогою наступної операції. Зробимо в кристалічній структурі уявний розріз по площині ABCD і зсунемо цю площину на відстань, рівну сталій (періоду) ґратки, в напрямку вказаному стрілкою (рис.1.1, б).



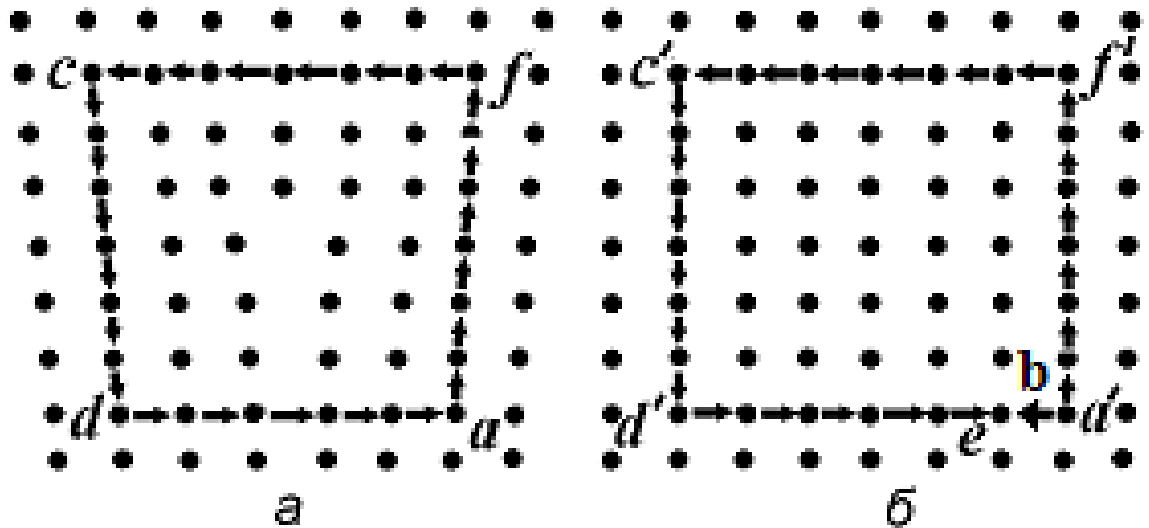
а) – крайова дислокація; б) – механізм утворення крайової дислокації

Рисунок 1.1 – Крайова дислокація і механізм її утворення

Якщо тепер знову з'єднати атоми у верхній та нижній частинах розрізу, то отримана структура буде правильною всюди, за винятком ділянки АВ. Таке порушення кристалічної структури називається крайовою дислокацією. Таку ж структуру можна отримати, не зсуваючи атоми ґратки на період, а вводячи в кристал напівплощину (екстраплощину). Вектор  $b$ , довжина якого дорівнює величині зсуву, називається вектором Бюргерса [1].

Величину і напрямок вектора Бюргерса для довільної дислокації можна визначити наступним чином. Здійснюється обхід дислокації по замкнутому

контуру, рухаючись по вузлах кристалічної ґратки. Траєкторія руху при цьому являє собою замкнутий контур (рис. 1.2, а). Цьому замкнутому контуру в реальному кристалі (з дислокацією) можна співставити контур в ідеальній кристалічній ґратці такого ж типу.



а – контур Бюргерса; б – вектор Бюргерса

Рисунок 1.2 – Визначення вектора Бюргерса шляхом побудови замкнутого контуру

Вектор, який з'єднує точки  $a'$  і  $e$  називається вектором Бюргерса  $b = \overline{a'e}$ , контури описаного типу – контурами Бюргерса.

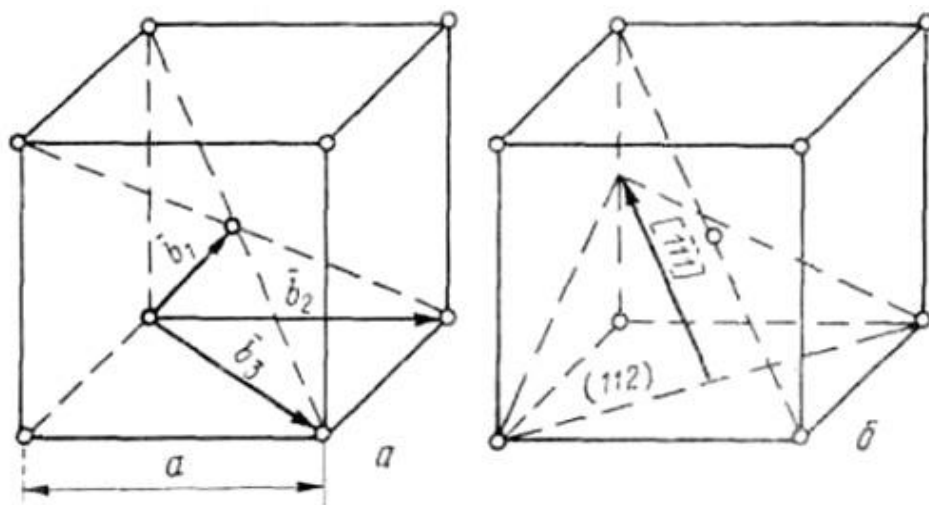
Крайова дислокація рухається в площині ковзання перпендикулярно самій собі, при цьому екстраплощина повинна збільшуватись або зменшуватись за рахунок приєднання або відділення атомів втілення чи вакансій [1]. Такий рух називається переповзанням.

Зазвичай вектор Бюргерса співпадає або кратний якому-небудь параметру ґратки, однак в кристалах можуть існувати і так звані часткові дислокації, у яких вектор Бюргерса менший за сталу ґратки [2]. Наявність таких дислокацій зумовлена стабільними дефектами пакування.

Дислокації в площинах ковзання прагнуть зайняти положення з найменшою вільною енергією, внаслідок чого вони зазвичай розташовуються

вздовж напрямків з малими кристалографічними індексами. Енергія положення дислокації визначається так званим потенціалом Пайерлса, що змінюється з періодичністю ґратки [1].

В ОЦК кристалах можливі наступні вектори Бюргерса:  $\vec{b}_1 = \frac{a}{2}(111)$ ,  $\vec{b}_2 = a(100)$ ,  $\vec{b}_3 = a(110)$  [2]. Дислокації, для яких вектором тотожної трансляції є вектор  $\frac{a}{2}(111)$ , мають найнижчу енергію, а тому зустрічаються найчастіше.



$a$  – вектори Бюргерса в ОЦК ґратці;  $b$  – площина ковзання дислокацій в ОЦК ґратці

Рисунок 1.3 – Вектори Бюргерса та система ковзання в ОЦК структурах [2]

Розглянемо рух дислокацій в ідеальному кристалі, де діють лише ті сили, які зумовлені періодичним потенціалом Пайерлса. Сила, що діє на одиницю довжини дислокації, рівна [1]:

$$f = \tau b, \quad (1.1)$$

де  $\tau$  – напруження зсуву;

$b$  – величина вектора Бюргерса.

За відсутності теплового збудження при зовнішньому навантаженні, що дорівнює силі  $f$ , повинен початись рух дислокацій. При 0 К граничне значення напруження зсуву (напруження Пайерлса), що призводить до руху дислокацій, становить [1]:

$$\tau_p = \frac{2\mu}{1-\nu} e^{-2\pi a/b(1-\nu)} \quad (1.2),$$

де  $\mu$  – коефіцієнт жорсткості;  
 $\nu$  – коефіцієнт Пуассона;  
 $a$  – відстань між площинами ковзання.

Швидкість деформації можна обчислити, використовуючи рівняння Орована [3]:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{1}{2} v \cdot b \cdot \rho, \quad (1.3)$$

де  $v$  – швидкість руху дислокацій;  
 $b$  – вектор Бюргерса;  
 $\rho$  – густина дислокацій.

В металах з ОЦК граткою ковзання дислокацій зазвичай відбувається по площинах  $\{110\}$  та  $\{112\}$  в напрямку найбільш щільного упакування атомів (111).

## 1.2 Взаємодія дислокацій з точковими дефектами

Пружну взаємодію дислокацій з точковими дефектами для випадку сторонніх міжвузельних атомів в ізотропному середовищі розглянули Коттрел і Білбі. Вони виходили з простого припущення, що чужорідний атом з радіусом  $r(1 + \varepsilon)$ , де  $\varepsilon \ll 1$  і  $r$  – радіус дірки в основному матеріалі гратки, в першому наближенні взаємодіє тільки з діагональними компонентами тензора напруги  $\sigma$ . Енергія взаємодії [4]:

$$E_h = -\frac{4}{3}\pi\epsilon r^3(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}), \quad (1.4)$$

де  $\sigma_{xx}$  і т. д. – нормальні напруження.

У цьому наближенні з точковими дефектами будуть взаємодіяти тільки дислокації, що мають крайову компоненту, що можна пояснити наступним чином: атоми, що відрізняються за розмірами від атомів основної ґратки, переміщаються до тих ділянок навколо дислокацій, де ґратка розтягнута або стиснута і, отже, де їм легше розміститись [4]. Гвинтові дислокації, які не викликають навколо себе об'ємних змін, в цьому відношенні не є ефективними.

Таким чином, сторонні атоми притягуються дислокацією і прагнуть зібратися навколо неї; кількість домішкових атомів, які збираються поблизу дислокації, залежить від температури.

Пружна поведінка вакансій і міжвузельних атомів аналогічна поведінці центрів стиску і розтягу; вони також притягуються до крайових дислокацій. Особливо це відноситься до міжвузельних атомів, так як навколо них існують великі деформації, які, крім того, навіть несиметричні і, отже, також можуть взаємодіяти і з гвинтовими дислокаціями. З іншого боку, пружна взаємодія між вакансіями і дислокаціями слабка, але в більшості твердих тіл мають місце електрична взаємодія й інші ефекти, пов'язані з відсутністю атома або іона в ґратці [4]. У загальному випадку завжди існує деяка взаємодія між точковими дефектами і дислокаціями. Отже, фізичний точковий дефект може бути поглинений дислокацією і при цьому повністю анігілює на ній. Механізм такого явища показано на рис. 1.4.



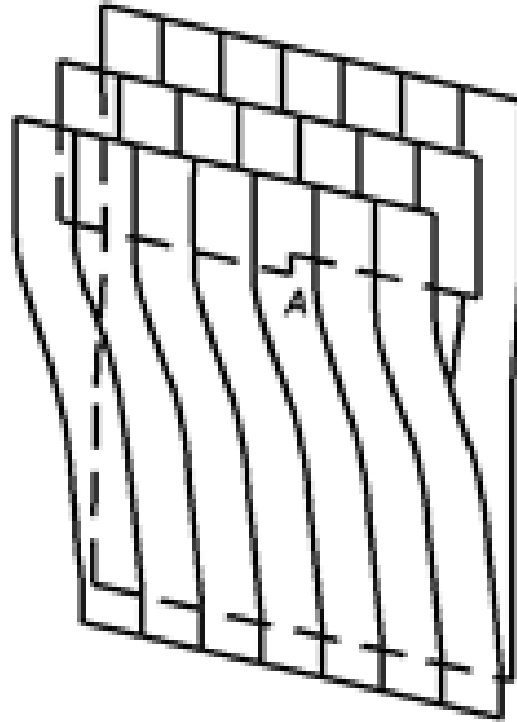


Рисунок 1.4 – Поглинання вакансії сходиною крайової дислокації [4]

Розглянемо крайову дислокацію, вісь якої переходить з однієї площини ковзання в іншу, розташовану вище на одну міжатомну відстань. Такий перехід називають сходиною. Висота сходинок на крайовій дислокації дорівнює одній міжатомній відстані. Коли вакансія підходить до сходинок, то сходинка зміщується на одну міжатомну відстань уздовж осі дислокації в положення А, а сама вакансія зникає. При поглинанні ж міжвузельного атому сходинка зсувається на міжатомну відстань в напрямку, протилежному зсуву при захопленні вакансії. Таким чином, сходинки є стоками для точкових дефектів. Точковий дефект, притягнувшись до будь-якого місця дислокації, мігрує вздовж неї до найближчої сходинок, де і захоплюється [4].

Якщо швидкість надходження вакансій і міжвузельних атомів до дислокації більша за швидкість їх зникнення на порогах, то ці дефекти можуть утворювати атмосферу довкола лінії дислокації типу котрелівської домішкової атмосфери [2].

### 1.3 Дифузія за механізмом випадкових блукань

За сучасними уявленнями дифузійні переміщення атомів на великі відстані здійснюються в результаті окремих хаотичних атомних стрибків. Якщо ці стрибки хаотичні, без будь-якого переважного напрямку, то атом робить випадкові блукання по кристалічній гратці. Дифузія в кристалі може служити прикладом досить спрощеного процесу випадкових блукань, оскільки правильну будову кристалічної гратки зумовлює можливість стрибків атомів тільки певної довжини і тільки в деяких дискретних напрямках [5].

Важливий випадок одновимірної дифузії можна описати в термінах випадкових блукань в одному напрямку з фіксованою довжиною стрибка. На підставі теорії випадкових блукань можна обчислити потік атомів між двома сусідніми атомними площинами в кристалі. Такий розрахунок безпосередньо призводить до відомого першого закону Фіка і дає просте вираження для коефіцієнта дифузії через атомні характеристики.

Потік атомів за першим законом Фіка пропорційний градієнту концентрації дифундуючих атомів:

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (1.5)$$

де  $J$  – результуюче число атомів дифундуючої речовини, які пройшли за одиницю часу через одиничну площу площини, що перпендикулярна осі  $x$ , вздовж якої здійснюється дифузія;

$c$  - концентрація атомів даного компоненту у цій площині (число атомів в одиниці об'єму);

$D$  – коефіцієнт дифузії,  $\text{см}^2/\text{с}$ .

Знак мінус в співвідношенні (1.5) вказує на те, що зазвичай потік атомів спрямований в бік зменшення концентрації. Внаслідок цього в ізольованій системі є тенденція до зникнення концентраційних градієнтів за рахунок дифузії.

Коефіцієнт дифузії в термінах теорії випадкових блукань можна записати (для простої кубічної ґратки) [5]:

$$D = \frac{1}{6} \lambda^2 \nu, \quad (1.6)$$

де  $\lambda$  – відстань між сусідніми кристалографічними площинами;  
 $\nu$  – частота стрибків дифундуючих атомів.

Цифра 6 в знаменнику у формулі (1.6) з'являється як число найближчих сусідніх позицій, куди може здійснити стрибок атом у кубічній ґратці.

Частота стрибків атомів залежить від температури  $T$  [5]:

$$\nu = \nu_0 e^{-Q/kT}, \quad (1.7)$$

де  $Q$  – енергія активації дифузії;  
 $k$  – стала Больцмана;  
 $\nu_0$  – константа.

Коефіцієнт дифузії  $D$  – макроскопічна величина, яка досить легко визначається експериментально, наприклад за допомогою відомого методу мічених атомів (радіоактивних ізотопів). Встановлено, що він залежить від температури кристала за законом Арреніуса:

$$D = D_0 e^{-Q/kT}, \quad (1.8)$$

де  $D_0$  – передекспоненціальний множник.

$D_0$  і  $Q$  не залежать від температури. Їх значення визначаються природою дифундуючих атомів, складом і структурою кристала-матриці. Крім того, на  $D_0$  і  $Q$  можуть впливати зовнішні сили і тиск.

Більш детально розглянемо енергію активації дифузії. Її величина безпосередньо пов'язана з атомними механізмами, за якими здійснюються

дифузійні стрибки. У загальному випадку, коли в дифузійному механізмі беруть участь дефекти кристалу, енергія активації дифузії залежить як від енергії утворення конкретного дефекту, так і від енергії активації його міграції [5]:

$$Q = E_f + E_m, \quad (1.9)$$

де  $E_f$  – енергія утворення дефекту;

$E_m$  – енергія активації міграції дефекту.

Якщо дифузія відбувається без участі дефектів, наприклад за прямим обміном атомів місцями, то  $E_f = 0$ , а  $Q = E_m$ . Але це не дає приводу сподіватися, що значення  $Q$  при цьому буде малим. Дифузійні механізми без участі дефектів для свого запуску вимагають зазвичай дуже високих значень енергій активації (для більшості металів ці значення перевищують кілька електронвольт) [5].

У той же час часто утворення і міграція дефектів відбуваються при досить невисоких  $Q$ . Ситуація ще спрощується, якщо кристал уже має дефекти, які утворились під час його росту, або спричинені механічною деформацією чи радіацією.

#### **1.4 «Дислокаційна дифузія»**

Термін «дислокаційна дифузія» (або «трубчаста дифузія») зазвичай застосовують при розгляді полегшеної дифузії вздовж лінійних дефектів в кристалах – дислокацій.

Перші висновки, які можна зробити аналізуючи міграцію таких дефектів, як вакансія або міжвузельний атом поблизу ядра дислокації, підказували рух цих точкових дефектів в ту область дислокації, де їх присутність призводить до максимального зменшення напружень [5]. Так, вакансія повинна притягатися в область стиснення над крайнім атомним рядом

зайвої напівплощини, а міжвузельний атом – в область розширення, розташовану під напівплощиною.

Автори [6] за допомогою комп'ютерного експерименту встановили, що в ядрах дислокацій енергії утворення і міграції вакансій зменшуються в середньому на 30 % – 40 % у порівнянні з цими ж значеннями в об'ємі кристалу. При цьому радіус області прискореної дифузії становив  $2 \text{ \AA} - 5 \text{ \AA}$ .

У роботі [7] порівнюються енергії активації і міграції вакансій та міжвузельних атомів при трубчастій дифузії в міді. Так, дані величини для вакансій і міжвузельних атомів є практично ідентичними. Також автори даної роботи наводять порівняння кількості перескоків вакансій та міжвузельних атомів у ядрі дислокації при різних температурах. Встановлено, що зі збільшенням температури системи кількість стрибків (відповідно, і частота стрибків) вакансій та міжвузельних атомів в ядрі дислокації зростає.

У роботі [8] досліджується коефіцієнт самодифузії заліза високої чистоти вздовж дислокацій методом радіоактивних ізотопів з пошаровим розпиленням поверхні зразка. Встановлено, що коефіцієнт самодифузії вздовж дислокації при температурах до 900 К повільно зростає з підвищенням температури. При подальшому зростанні температури (вище 900 К) спостерігається стрімке зростання коефіцієнта самодифузії.

### **1.5 Утворення дефектів при імпульсному впливі**

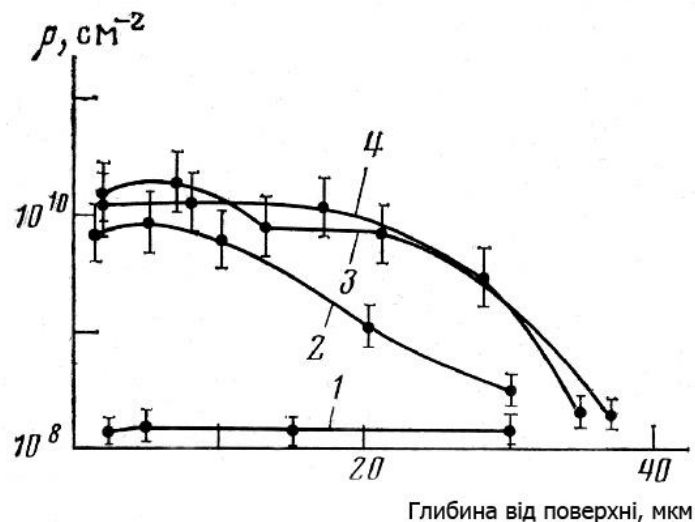
Велика кількість досліджень ґрунтується на вивченні розподілу густини дислокацій з глибиною, в залежності від типу поверхневої обробки, проте сам механізм утворення і руху дислокацій при імпульсному впливі достовірно не відомий.

Дослідження в роботах [9-10] показали, що структура зразків після імпульсного лазерного впливу характеризується нерівномірним розподілом дислокацій по глибині металу (табл. 1.1).

Таблиця 1.1 – Розподіл густини дислокацій в молібдені після імпульсної лазерної обробки [11]

Відстань від центра удару, см	Густина дислокацій, см <sup>-2</sup>
0	$5 \cdot 10^9$
0,05	$2 \cdot 10^9$
0,15	$7 \cdot 10^8$
0,5	$4 \cdot 10^7$

Вивчення дислокаційної структури після ударної обробки [12-13] показало, що максимальний приріст густини дислокацій в приповерхневих шарах відбувається після перших актів впливу. Зі збільшенням кількості імпульсів оптичного квантового генератора (ОКГ) густина дислокацій збільшується не суттєво, а відбувається лише їх перерозподіл (рис.1.5).



1 – вихідний стан; 2–4 – після 1, 5 й 10 циклів опромінення

Рисунок 1.5 – Зміна густини дислокацій з глибиною в армо-залізі після багаторазового лазерного впливу в режимі модульованої добротності [14]

У роботі [15] показано, що після імпульсної механічної обробки густина дислокацій в залізі зростає на три порядки, в порівнянні з вихідним зразком. При цьому збільшення густини дислокацій спостерігається і на відстані 11 мкм від місця імпульсного впливу (табл. 1.2).

Таблиця 1.2 – Розподіл густини дислокацій  $\rho$  в залізі за глибиною  $d$  після імпульсного механічного навантаження [15]

$d$ , мкм	$\rho \times 10^{12}$ , см <sup>-2</sup>
2,1	6,23
4,1	1,22
6,1	0,935
11,4	0,343

Окрім лінійних дефектів в металах при різного роду навантаженнях утворюються точкові дефекти. В роботі [16] концентрації точкових дефектів і дислокацій в міді після обробки тиском (табл. 1.3).

Таблиця 1.3 – Густина дефектів в міді після обробки тиском при 77 К [16]

Тиск, ГПа	Концентрація міжвузлових атомів, ат.%	Концентрація вакансій, ат.%	Густина дислокацій, см <sup>-2</sup>
0	–	$1,5 \cdot 10^{-19}$	$1 \cdot 10^{-7}$
17	$4,9 \cdot 10^{-3}$	$7,1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{11}$
21	$5,3 \cdot 10^{-3}$	$6,4 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{11}$
50	$5,7 \cdot 10^{-3}$	$16,5 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{11}$

Враховуючи те, що в металах має місце трубчаста дифузія, то утворення лінійних і точкових дефектів при різного роду обробках матеріалів може сприяти прискореному масопереносу в них.

### 1.6 Масоперенос при імпульсному впливі

Відомо, що лазерна обробка з високою частотою електромагнітного поля в імпульсі (до сотень ГГц) суттєво впливає на процеси масопереносу та фазоутворення в металах [11].

В більшості випадків лазерна обробка призводить до оплавлення оброблюваної ділянки металу, проте є дослідження, при яких вивчення дифузійних процесів у металах і сплавах проводилося за умов, коли взаємодія лазерного випромінювання з металом практично не призводила до утворення рідкої фази [17-18].

Не дивлячись на суттєвий ріст густини дислокацій в процесі лазерного впливу, попереднє введення дислокацій в приповерхневий шар, наприклад, за допомогою пластичної деформації, помітно впливає на рухливість атомів при лазерній обробці [11, 19]. Аналогічним чином на швидкість міграції атомів при опроміненні імпульсами ОКГ впливає попереднє введення додаткових вакансій за допомогою гартування від різних температур.

У роботі [17] встановлено прискорення дифузійної рухливості власних атомів у залізі при кімнатній температурі в умовах лазерної обробки без нагріву в режимі гігантських імпульсів. Розрахований коефіцієнт самодифузії заліза становив  $1,6 \cdot 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}$ , що на багато порядків перевищує рухливість атомів в рівноважних умовах навіть при температурах, близьких до температури плавлення. Отриманий результат прискореного масоперенесення пояснюється реалізацією міжвузельного механізму міграції власних атомів, що проявляється при швидкій пластичній деформації.

Описаний вище механізм прискореного масопереносу отримав назву «аномальне масоперенесення» – перенесення власних та домішкових атомів в кристалах зі швидкістю, що на декілька порядків перевищує швидкість їх дифузії [20]. Аномальне масоперенесення є результатом динамічного повернення точкових дефектів, що утворились внаслідок деформації та спостерігається при швидкостях деформації  $1 \text{ с}^{-1}$ .

### **1.7 Комп'ютерне моделювання дефектів та дифузійних процесів у металах**

В типовому масивному матеріалі наявна дуже велика кількість атомів (порядку  $10^{24}$  або і більше), і на основі звіту про поведінку кожного атома



описують властивості даного матеріалу. Особливі випадки, такі як ідеальні кристали, є винятками, в яких наявна симетрія зменшує кількість незалежних атомів до дуже малої; в таких випадках властивості твердого тіла описуються на основі поведінки декількох незалежних атомів, і цього можна досягти, використовуючи квантово-механічні методи. Однак це лише ідеалізована модель твердих тіл, в яких ідеальна структура порушується внаслідок теплового впливу, або ж наявності дефектів, які відіграють ключову роль у визначенні фізичних властивостей системи [21].

Як зазначалось раніше, дислокації є одним із видів кристалічних дефектів, які визначають механічні властивості твердих тіл. Вони містять ядро, яке, в свою чергу, створює в кристалі далекодіючі поля напружень, що описуються континуальною теорією пружності [21]. Ця ситуація характеризує дилему опису поведінки реальних матеріалів: з одного боку, поведінка більшості атомів, що знаходяться на великих відстанях від дефектів, відповідає макроскопічному опису континууму, де атомна гіпотеза не має значення, а з іншого – та мала кількість атомів, що знаходяться у безпосередній близькості до дефекту, не відповідає цьому правилу і потребує індивідуального опису. Ніякий аспект, чи то атомістичний, чи макроскопічний, не може забезпечити точний опис дефектів і їхню роль у визначенні поведінки матеріалу.

Будь який інший тип кристалічних дефектів (вакансія, домішка, границя зерна, поверхня і т. д.), так само, як і дислокація, вимагає, на певному рівні, атомного представлення для розуміння його впливу на властивості матеріалу. Так само і порушення кристалічної впорядкованості зумовлені тепловим рухом, чи іншою зовнішньою дією (тиск, випромінювання), можуть призвести до змін у структурі твердого тіла, можливо, до переходу його в інший фазовий стан, який також вимагає деталізованого атомістичного опису. З цих міркувань доречним є опис властивостей матеріалів на основі атомістичного моделювання з розумним вибором аспектів, які повинні бути враховані і змодельовані на атомному рівні [21].

Термін «атомістичне моделювання» набув особливого значення і відноситься до обчислювальних досліджень властивостей матеріалів відповідно до законів класичної динаміки (так званий молекулярно-динамічний підхід або МД), або шляхом вибірки розподілу вибраного ансамблю (стохастичний підхід Монте-Карло). Енергії, що лежать в основі розрахунку сил для динаміки атомів чи розподілу ансамблю можуть ґрунтуватись на класичному описі або квантово-механічному [21].

### 1.7.1 Атомістичне моделювання

В ідеалі енергія системи як функція атомних позицій повинна розраховуватись в рамках квантової механіки з валентними електронами, що забезпечують зв'язок між атомами. Розвиток теорії функціоналу щільності [22-23] та теорії псевдопотенціалів [24] сприяв створенню точної і ефективної методики розрахунків, яка має необхідні хімічні властивості для опису широкого спектру властивостей матеріалів в рамках квантової механіки [25]. Основна ідея полягає в застосуванні або спрощеного квантово-механічного підходу для електронів, або чисто класичного, в якому ступені свободи електронів повністю усуваються і міжатомні взаємодії описуються ефективним потенціалом. Це необхідно для спрощення розрахунків, що дозволяє обробляти системи з великою кількістю атомів (від декількох тисяч до мільйонів).

Для металевих систем метою потенціалу є реалістичний опис середовища втіленого атома на фоні валентних електронів твердого тіла. Такий підхід називається методом втіленого атома [26].

Певні аспекти атомістичного моделювання, особливо методами молекулярної динаміки та Монте-Карло, роблять цей підхід досить унікальним. Основна його концепція – це відстеження руху частинок. Ось основні характеристики, властиві даним методам [21]:

- 1) Декілька сотень частинок цілком достатньо для моделювання об'ємних властивостей матеріалу. Об'ємні або макроскопічні властивості, такі

як тиск чи температура, можна визначити за допомогою змодельованої комірки, яка містить менше тисячі атомів, хоча кількість атомів у типовій макроскопічній системі сягає порядку числа Авогадро –  $6 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>;

2) Моделювання дозволяє об'єднати вивчення всіх фізичних властивостей. За одне моделювання можна отримати дані про траєкторії частинок чи їх конфігурації, за допомогою яких обчислити необхідні властивості: структурні, термодинамічні, вібраційні, механічні, транспортні і т.д.;

3) Моделювання забезпечує прямий зв'язок між фундаментальним описом матеріальної системи, таким як внутрішня енергія і атомна структура, і всіма необхідними фізичними властивостями. По суті, це «чисельна теорія матерії»;

4) У моделюванні можна контролювати умови, за яких проводиться дослідження. Це стосується особливостей міжатомних взаємодій і початкових та граничних умов. Маючи цю інформацію та вихідні дані для моделювання, можна досягти точних характеристик матеріалу.

5) За допомогою моделювання можна отримати властивості, які неможливо визначити емпіричним шляхом. У випадку, коли випробування вимагає умов, не доступних для лабораторного експерименту, моделювання може відігравати роль експерименту. І навпаки – у тих випадках, коли немає ніякої теорії для інтерпретації експерименту, моделювання може відігравати роль теорії;

6) Моделювання дає можливість безпосередньої візуалізації фізичних явищ. Візуалізація може відігравати важливу роль в моделюванні на всіх рівнях, наприклад, для обговорення результатів, висування фізичної теорії та відкриття.

Проте атомістичне моделювання має й деякі обмеження [21]:

1) Перші принципи квантово-механічного опису атомних взаємодій обмежені малою кількістю атомів (в порівнянні з макроскопічними масштабами) та коротким часовим проміжком моделювання: поведінку

кількох сотень атомів можна простежити лише протягом кількох сотень фемтосекунд. Опис більших систем протягом більш тривалого часу вимагає введення апроксимації в квантово-механічний метод, що значно обмежує точність. Альтернативою є використання чисто класичного опису на основі емпіричних потенціалів для опису міжатомних взаємодій. Однак, такий підхід вводить більш жорстке наближення, що обмежує здатність реально фіксувати, як утворюються і зникають зв'язки між атомами в процесі моделювання. В свою чергу, це обмежує сферу фізичних явищ, яку моделювання може успішно охопити.

2) Інше обмеження спричинене практичним питанням, тобто обмежені властивості комп'ютерної техніки. Це накладає обмеження на просторовий розмір моделі (зазвичай ототожнюється з кількістю атомів у системі) і часові масштаби. Для вирішення цього питання протягом останніх років використовується новий підхід, який носить назву «мультимасштабне моделювання» і поєднує різні типи опису системи (квантовий, класичний і континуальний) в єдиний метод.

### **1.7.2 Основи методу молекулярної динаміки**

Метод молекулярної динаміки (ММД) полягає в наступному. Розглядається великий ансамбль частинок, що імітують атоми або молекули. Вважається, що частинки взаємодіють одна з одною і, крім того, можуть піддаватися зовнішньому впливу. У переважній більшості випадків частинки вважаються матеріальними точками. Для всіх частинок записуються рівняння руху і отримана система рівнянь вирішується чисельно. Бурхливий розвиток обчислювальної техніки дозволяє вирішувати подібні завдання для все більшого і більшого числа частинок. Однак змоделювати макроскопічне тіло, співставляючи кожному його атому матеріальну точку, в даний час неможливо. Тому при вирішенні задач деформування макроскопічних тіл матеріальні точки імітують не атоми або молекули, а більші утворення, що включають в себе сотні і тисячі атомів. У цьому випадку метод прийнято

називати методом динаміки частинок, хоча з математичної точки зору він не відрізняється від методу молекулярної динаміки [27].

В основі методів молекулярної динаміки та динаміки частинок лежать парні потенціали взаємодії типу Ленарда-Джонса. Поняття парного потенціалу має на увазі те, що взаємодія двох частинок залежить тільки від їх взаємного розташування і не залежить від положення будь-яких інших частинок. Всі потенціали типу Ленарда-Джонса описують взаємодію, для якої характерне відштовхування при малих відстанях і притягування при великих. Ці потенціали мають вигляд, зображений на рисунку 1.6. Вони відрізняються рівноважною відстанню, глибиною і шириною потенціальної ями, а також швидкістю зменшення на нескінченності.

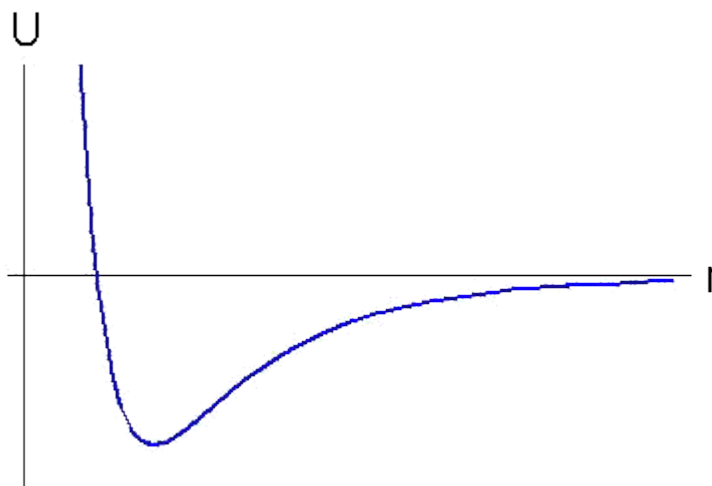


Рисунок 1.6 – Залежність потенціальної енергії частинок від відстані між ними [28]

Потенціали типу Ленарда-Джонса дозволяють на якісному рівні правильно описувати багато фізичних явищ і властивості речовин. Разом з тим, добре відомо, що парні потенціали мають принципові недоліки. Одним з головних недоліків є те, що парні потенціали, як правило, можуть забезпечити стійкість тільки досить щільно упакованих кристалічних решіток. Ґратки з більш низькою щільністю упаковки, такі як проста кубічна решітка,

виявляються нестійкими для більшості парних потенціалів (обговорюється випадок, коли взаємодії всіх атомів решітки описуються за допомогою одного і того ж потенціалу). Також нестійкими виявляються структури, характерні для ковалентних кристалів - структура графіту на площині і структура алмазу в просторі. Крім того, парна взаємодія не може забезпечити стійкість просторової структури і адекватно описати частоти коливань більшості багатоатомних молекул [27].

Завдання молекулярної динаміки стосовно опису поведінки кристалічних ґраток, як правило, вирішуються в рамках механіки Ньютона, де розглядаються тільки поступальні переміщення і відповідні їм взаємодії. Це означає, що будь-яка модель кристалічної решітки або багатоатомної молекули, побудована на основі парних потенціалів, являє собою шарнірну конструкцію. Зрозуміло, що далеко не кожна шарнірна конструкція має стійкість. У всіх шарнірних конструкціях, в яких можливі деформації, що не змінюють довжину зв'язків, положення рівноваги є незмінним. Саме такими шарнірними конструкціями є моделі нещільноупакованих ґраток, в яких враховуються тільки валентні зв'язки (тобто взаємодії найближчих сусідніх атомів). Прикладом може служити графеновий шар (рис. 1.7).

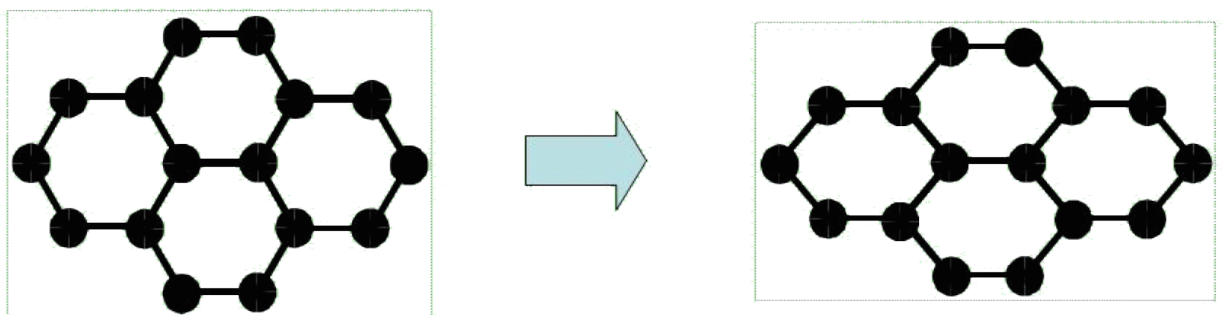


Рисунок 1.7 – Деформація структури графену під впливом міжатомної взаємодії [28]

Вплив подальших сусідніх атомів може перетворити стійке становище рівноваги в нестійке, якщо сили взаємодії з подальшими сусідніми атомами

будуть не поворотними, а дестабілізуючими. Саме це і відбувається в моделях більшості нещільноупакованих ґраток і багатоатомних молекул, оскільки відстані між найдальшими сусідніми атомами знаходяться на нестійкій ділянці потенціалу взаємодії. Очевидно, що для вирішення проблеми треба вводити в розгляд взаємодії, здатні чинити опір зміні кутів між зв'язками.

Традиційне рішення перерахованих проблем полягає в застосуванні багаточастинкових потенціалів взаємодії. Подібні потенціали залежать від кутів між зв'язками, що дозволяє зробити стійкими структури з низькою щільністю заповнення і адекватно описати частоти коливань ряду молекулярних сполук [27]. Найпростішим прикладом багаточастинкової взаємодії є модель триатомної молекули, зображена на рисунку 1.8.

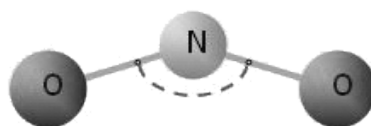


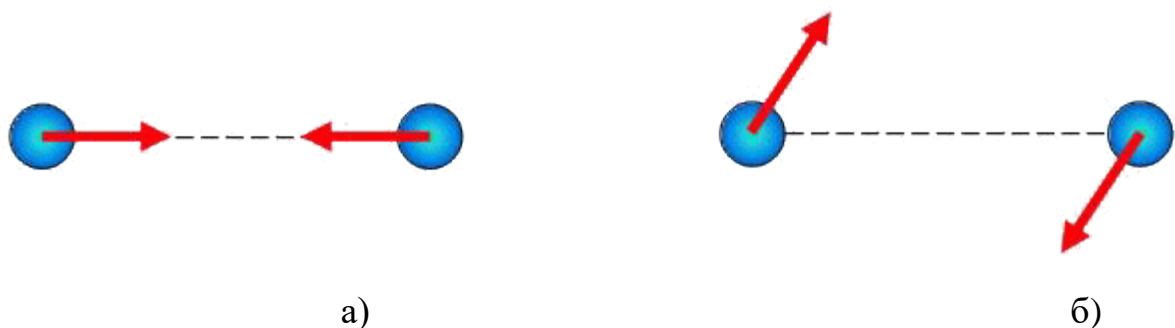
Рисунок 1.8 – Модель триатомної молекули [28]

Взаємодія атомів в цій молекулі описується за допомогою трьохчастинкового потенціалу і характеризується двома величинами: жорсткістю зв'язку N-O і жорсткістю валентного кута. На жаль, як правило, форма багаточастинкових потенціалів виявляється досить складною, а фізичний зміст констант, що входять до них, - туманним. Константи обчислюються у відповідності з фізичними властивостями модельованих речовин, однак, при переході від однієї кристалічної структури до іншої (наприклад, графіт - алмаз) доводиться повністю міняти потенціал взаємодії [28]. Багаточастинкові потенціали взаємодії набули великого поширення і при описі молекулярних систем, однак, найчастіше, цей підхід виявляється суто емпіричним, вимагає підбору великого числа констант, справедливих лише для даного конкретного з'єднання. Головним недоліком багаточастинкових потенціалів є те, що вони втрачають будь-який фізичний

зміст при дисоціації молекул і руйнуванні кристалічних ґраток, а отже, в сферу їх можливого використання не потрапляє величезний клас задач.

Альтернативний підхід полягає у врахуванні моментного вкладу в міжатомну взаємодію. Урахування парного моменту взаємодії (додатково до парного силового) може забезпечити стійкість кристалічних структур з низькою щільністю упаковки. Моментна взаємодія - це реакція на обертальні рухи. Якщо атоми, що знаходяться у вузлах кристалічної ґратки, моделюються не матеріальними точками, а частинками з обертальними ступенями свободи, і зв'язки між атомами володіють жорсткістю до повороту, то модель кристалічної ґратки вже не є шарнірною конструкцією. Така модель володіє жорсткістю по відношенню до будь-яких деформацій і при обліку тільки валентних зв'язків вона буде стійкою [28]. Що ж станеться з цією моделлю ґратки в результаті дестабілізуючого впливу подальших сусідніх атомів? Перш ніж відповісти на це питання, обговоримо важлива відмінність силових взаємодій в системі частинок загального вигляду від силових взаємодій в системі матеріальних точок.

У механіці Ньютона, де розглядаються системи матеріальних точок, сили є центральними, тобто спрямованими по лінії, що з'єднує взаємодіючі точки [27]. Наприклад, третій закон Ньютона для матеріальних точок має вигляд, зображений на рисунку 1.9, а.



а) – механіка Ньютона; б) – механіка Ейлера

Рисунок 1.9 – Моделі взаємодії частинок [28]



У механіці Ейлера, де розглядаються системи частинок з обертовими ступенями свободи, сили не зобов'язані бути центральними. Третій закон Ньютона для частинок з обертовими ступенями свободи має вигляд, зображений на рисунку 1.9, б. Нецентральність взаємодій в механіці Ейлера безпосередньо пов'язана з тим, що взаємодія частинок з обертовими ступенями свободи характеризується парою векторів – вектором сили і вектором моменту, причому вектор моменту, в загальному випадку, не є моментом сили, а являє собою абсолютно незалежну характеристику взаємодії. Як є два незалежних виду руху – поступальний (трансляційний) рух і обертальний (спіновий) рух, так є і два незалежних види взаємодій – силова і моментна. Таким чином, в механіці Ейлера, завдяки наявності зосереджених моментів, можливе виникнення сил, перпендикулярних до зв'язків. В системі матеріальних точок це неможливо [28].

Повернемося тепер до питання про кристалічну ґратку. Нестійкість кристалічних ґраток зумовлена тим, що валентні зв'язки не можуть компенсувати дестабілізуючий вплив інших атомів. При моделюванні атомів матеріальними точками це відбувається через те, що центральні сили створюють опір переміщенням не у всіх напрямках. При моделюванні атомів частинками загального вигляду валентні зв'язки володіють не тільки поздовжньою, але і поперечною жорсткістю, в результаті чого вони створюють опір будь-яким переміщенням. Якщо поздовжня і поперечна жорсткості валентних зв'язків виявляються досить великими, сили взаємодії з найближчими сусідніми атомами скомпенсують дестабілізуючий вплив подальших атомів і модель кристалічної ґратки буде стійкою.

Створення багаточастинкових потенціалів є спробою привнести моментні взаємодії в механіку матеріальних точок. Оскільки самі по собі матеріальні точки не можуть сприймати моментні впливи і реагувати на них, доводиться вводити в розгляд взаємодії, що залежать від кутів між зв'язками. Кожен кут між зв'язками визначається положенням трьох атомів - звідси і багаточастинкові потенціали. Такий підхід, можливий, але непослідовний.

Тому, не дивно, що багаточастинкові потенціали мають дуже складний вид [28].

Історично метод молекулярної динаміки виник у молекулярній фізиці. В молекулярній фізиці цей метод отримав свій розвиток і обґрунтування, фахівцями з молекулярної фізики були запропоновані різноманітні потенціали взаємодії. Зауважимо, що у фізиці основною моделлю є матеріальна точка, тому моментні потенціали взаємодії в чистому вигляді тут виникнути не могли. Спроби врахувати моментні взаємодії привели до зараз відомих як багаточастинкових потенціалів. Що стосується завдань механіки тіл, що деформуються, метод молекулярної динаміки (тут вже метод динаміки частинок) почав використовуватися як дещо цілком сформоване. При вирішенні широкого класу задач використання відомих потенціалів взаємодії дало хороші результати. Разом з тим, саме в механіці є фізичні ідеї та математичні методи, пов'язані з описом моментних взаємодій частинок загального вигляду. Моментні теорії розвиваються в механіці уже кілька століть. В основі таких популярних в інженерних розрахунках механічних моделей, як стрижні і оболонки, лежить ідея обліку обертальних ступенів свободи і моментних взаємодій [27]. Сучасні дослідження в цій області пов'язані зі створенням різних тривимірних моделей континуальної механіки, що враховують обертальні ступені свободи і моментні взаємодії. Інтерес до подібних моделей обумовлений тим, що вони мають властивості, характерні, наприклад, для п'єзоелектриків або феромагнетиків, тобто матеріалів, в яких механічні деформації безпосередньо пов'язані з проявом електричних і магнітних явищ.

### **1.7.3 Моделювання дислокацій, точкових дефектів та процесів масоперенесення в металах**

Вивчення руху дислокацій та їх взаємодії з точковими дефектами за допомогою комп'ютерного моделювання знайшло широке застосування у наші дні.

На сьогодні існує три основні групи методів для моделювання дислокацій:

I. Моделювання з використанням періодичних граничних умов вздовж осі дислокації та жорстких граничних умов в напрямку її вектора Бюргерса. Таким чином можна вивчати структуру та властивості ядра дислокації [29], визначати енергію її ковзання [30] та вивчати її взаємодію з іншими дефектами [31], проте динаміку руху дислокацій таким методом дослідити не можна.

II. Моделювання з використанням періодичних граничних умов як вздовж осі дислокації, так і в напрямку її вектора Бюргерса [32–33]. Таким чином можна вивчати динаміку руху дислокацій, але сам кристал при цьому знаходиться в напруженому стані.

III. Моделювання з використанням граничних умов на основі функції Гріна [34]. Це дає можливість моделювати гнучкі граничні умови відповідно до пружних властивостей кристалу та забезпечує коректне відтворення структури ядра дислокації і динаміки її руху за меншого числа атомів.

Найбільш застосовуваною є друга модель, яка передбачає використання періодичних граничних умов в напрямку лінії дислокації та перпендикулярному до нього. Автори [35] досліджували поведінку двох сусідніх дислокацій одного знаку в кристалі алюмінію. В процесі дослідження спостерігались коливання відстані між ядрами дислокацій та поперечні коливання кожної дислокації (вигин дислокаційної лінії).

В роботі [36] наведено дані комп'ютерного моделювання та експериментальних досліджень, що стосуються енергії утворення та міграції точкових дефектів в різних металах.

Автор роботи [37] наводить результати моделювання процесів самодифузії в ядрах крайової та гвинтової дислокацій. Встановлено, що дифузія вздовж крайової дислокації відбувається за вакансійним механізмом. Також показано, що при підвищених температурах дислокації є пасткою для точкових дефектів.

## 2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

### 2.1 Матеріали для комп'ютерного моделювання

В комп'ютерному моделюванні методом молекулярної динаміки необхідним є використання потенціалу міжатомної взаємодії. В даному випадку для дослідження було обрано метал з об'ємноцентрованою кубічною граткою – залізо, а потенціал, який описував міжатомні взаємодії, ґрунтувався на методі втіленого атома (EAM – embedded atom method).

Як відомо, залізо існує у вигляді двох кристалічних модифікацій: ОЦК ( $\alpha$ -Fe) і ГЦК ( $\gamma$ -Fe). Температура  $\alpha \leftrightarrow \gamma$  переходу становить 1283 К. Період гратки при кімнатній температурі  $a=0,2866$  нм. Атомний радіус  $r=0,127$  нм.

З практичної точки зору, залізо вже використовувалось в ряді емпіричних експериментів [17-18, 38-40] для дослідження прискореного масоперенесення. В даній роботі використовується комп'ютерне моделювання для дослідження динаміки руху дислокацій та їх взаємодії з наявними в системі точковими дефектами.

Змодельований дослідний зразок складався з 26255 атомів. Розміри зразка становили: 17,9 нм вздовж осі X, 8,6 нм вздовж осі Y та 2 нм вздовж осі Z. Вихідний код для моделювання в програмі XMD наведено в додатку А. Дослідження проводилось при трьох температурах: 77 К (температура рідкого азоту), 300 К та 900 К (0,5 від температури плавлення заліза), і для кожної з температур при трьох різних швидкостях деформації (див. п. 2.5).

### 2.2 Методика побудови крайової дислокації та міжвузельного атому

Як відомо, напрямком найщільнішого пакування в ОЦК-гратці є напрямок [111], площинами найлегшого ковзання в такій структурі є (112) та (110) [3], які ковзають вздовж цього напрямку. Тому, для наглядного спостереження за рухом дислокації, координати в системі розташовувались наступним чином: вісь X співпадала з напрямком [111] ОЦК-структури, вісь Y співпадала з напрямком  $[11\bar{2}]$  та вісь Z – з напрямком  $[\bar{1}10]$ . В даній моделі

лінія дислокації співпадає з віссю  $Z$ , а нормаль до площини ковзання – з віссю  $Y$ . Для утворення дислокацій з середини нижньої частини кристалу видалялись шість напівплощин, а решта атомних площин, що залишилися в цій частині кристалу зміщувались в напрямку центру таким чином, щоб заповнити утворену пустоту. Внаслідок такої операції в зразку утворювались дві повні дислокації з векторами Бюргерса  $b = \frac{a}{2}(111)$ . Щільність дислокацій становила  $6,6 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$ . В описаній вище системі координат площиною ковзання дислокацій є площина  $(11\bar{2})$ , самі ж дислокації лежать в площині  $(110)$ .

Для утворення міжвузельного атому видалявся один довільний атом у бездефектній області кристалу, а замість нього поміщались два атоми в гантельній конфігурації, при цьому гантельна конфігурація розташовувалась в напрямку  $[110]$ , який є найбільш ймовірним для утворення гантелі в ОЦК гратці [2].

### 2.3 Вибір потенціалу взаємодії

Багато процесів в матеріалах, таких як пластична деформація, руйнування, дифузія та фазові перетворення, включають великі ансамблі атомів і / або вимагають статистичного усереднення за багатьма атомними взаємодіями. Комп'ютерне моделювання таких процесів стало можливим завдяки використанню напівемпіричних міжатомних потенціалів, що дозволяють швидко обчислювати загальну енергію та класичні міжатомні сили. Завдяки їх обчислювальній ефективності, міжатомні потенціали надають доступ до систем, що містять мільйони атомів, і дають можливість створювати молекулярно-динамічні моделі на десятки і навіть сотні наносекунд. Сучасні потенціали визначають найважливіші особливості міжатомних зв'язків, досягаючи компромісу між обчислювальними швидкостями та точністю моделювання [21].

Молекулярна динаміка, Монте-Карло та інші методи моделювання вимагають численних оцінок ньютонівських сил  $F_i$ , що діють на окремі атоми

або (у випадку моделювання Монте-Карло) загальної енергії системи  $E_{tot}$ . Атомістичні потенціали, також називаються силовими полями, які параметризують конфігураційний простір системи та представляють його загальну енергію як відносно просту функцію. Міжатомні сили потім отримують як координатні похідні  $E_{tot}$  [21]:

$$F_i = -\frac{\partial E_{tot}}{\partial r_i}, \quad (2.1)$$

де  $r_i$  – радіус-вектор атома;

$E_{tot}$  – загальна енергія системи.

Цей розрахунок  $E_{tot}$  і  $F_i$  – проста і швидка чисельна процедура, яка не передбачає квантово-механічних розрахунків, хоча останні часто використовуються при генерації потенціалів.

Раннє атомістичне моделювання використовувало парні потенціали, як правило, типу Морзе або Леннарда-Джонса [41-42]. Такі потенціали були і залишаються корисною моделлю для фундаментальних досліджень загальних властивостей матеріалів, оскільки співпадіння між результатами моделювання та експериментом дуже добрі. Такі потенціали можуть бути фізично виправданими для інертних елементів і, можливо, для деяких іонних твердих речовин, проте вони не фіксують природу атомного з'єднання навіть у простих металах, не кажучи вже про перехідні метали або ковалентні тверді речовини [21].

Автори [43-44] запропонували більш прогресивну форму потенціалів, яка отримала назву методу вбудованого атома (ЕАМ). На відміну від парних потенціалів, ЕАМ включає багато видів взаємодій між атомами, які відповідають за значну частину зв'язків в металах. У моделі ЕАМ,  $E_{tot}$  задається виразом [21]:

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i,j (j \neq i)} V_{s_i s_j}(r_{ij}) + \sum_i F_{s_i}(\bar{p}_i), \quad (2.2)$$

де перший доданок є сумою всіх парних взаємодій між атомами  $V_{s_i s_j}(r_{ij})$ , будучи парним потенціалом взаємодії між атомами  $i$  (хімічного сорту  $s_i$ ) та  $j$  (хімічного сорту  $s_j$ ) з координатами  $r_i$  та  $r_j = r_i + r_{ij}$ ;

функція  $F_{s_i}$  – енергія втілення атома  $i$ , яка залежить від повної електронної густини  $\bar{\rho}_i$  в точці  $i$ , спричиненої всіма іншими атомами системи.

ЕАМ потенціали добре працюють в переважній більшості атомістичних симуляцій металевих матеріалів. Вони широко використовуються при моделюванні точкових дефектів [45-46], границь зерен, дислокацій, процесів руйнування [21], дифузії та інших [47]. ЕАМ потенціали мають хорошу кількість достовірних результатів для вивчення різноманітних властивостей матеріалів. Для металів пружні константи та енергії утворення вакансій відтворюються з високою точністю. Поверхневі енергії, як правило, на 10–20% менші за експериментальні дані. Поверхневі релаксації та перебудови, зазвичай, добре узгоджуються з експериментом [21].

В даній роботі моделювання проводилось із використанням ЕАМ-потенціалу для трикомпонентної системи Cu-Fe-Ni.

#### 2.4 Визначення кроку по часу

Для того, щоб простежити поведінку системи в більш тривалому часовому проміжку, логічно задавати більший крок по часу в розрахунках. Однак при цьому не повинно виникати похибок, пов'язаних з неточним розрахунком траєкторії руху атомів. При описі поведінки атомів у гратці крок не може перевищити 0,25 від періоду коливань атома, так як при цьому буде некоректно описуватися траєкторія коливального руху атомів поблизу положення рівноваги. Для того щоб забезпечити консервативність системи, крок вибирають меншим, ніж величина, зворотна максимальній частоті спектру коливань у даній системі [48]. Зазвичай, для одноатомних систем характерний крок за часом становить приблизно  $10^{-14}$  с [48]. Значне зменшення кроку за часом також небажане, тому що це зменшує доступний реальний час

спостереження за системою. Крім того, точність обчислень в міру зменшення кроку з певного значення, замість збільшення, починає падати. Це викликано тим, що накопичується похибка, пов'язана з похибкою округлення величин на комп'ютері.

Для нашої системи крок по часу становив  $3 \cdot 10^{-15}$  с.

## **2.5 Вибір граничних умов та методика моделювання пластичної деформації**

Існує два основних типи граничних умов: жорсткі граничні умови (ЖГУ) та періодичні граничні умови (ПГУ). ЖГУ ідеально підходять для вивчення кластерів та молекул, тоді як ПГУ підходять для вивчення об'ємних рідин та твердих речовин. Також можуть існувати змішані граничні умови, для яких передбачаються періодичні умови в деяких напрямках та жорсткі в інших.

У ЖГУ система з  $N$ -частинок оточена вакуумом; ці частинки взаємодіють між собою, але передбачається, що вони настільки далекі від усього іншого, що не відбувається взаємодія з зовнішнім середовищем, за винятком можливого реагування на деякий добре виражений "зовнішній вплив". У ПГУ відстежується рух  $N$  частинок в так званій суперкомірці, але ця суперкомірка оточена нескінченною кількістю повторюваних, періодичних образів самої себе. Тому частинка може взаємодіяти не тільки з частинками тієї ж суперкомірки, а також з частинками у сусідніх образах суперкомірки (рис. 2.1).



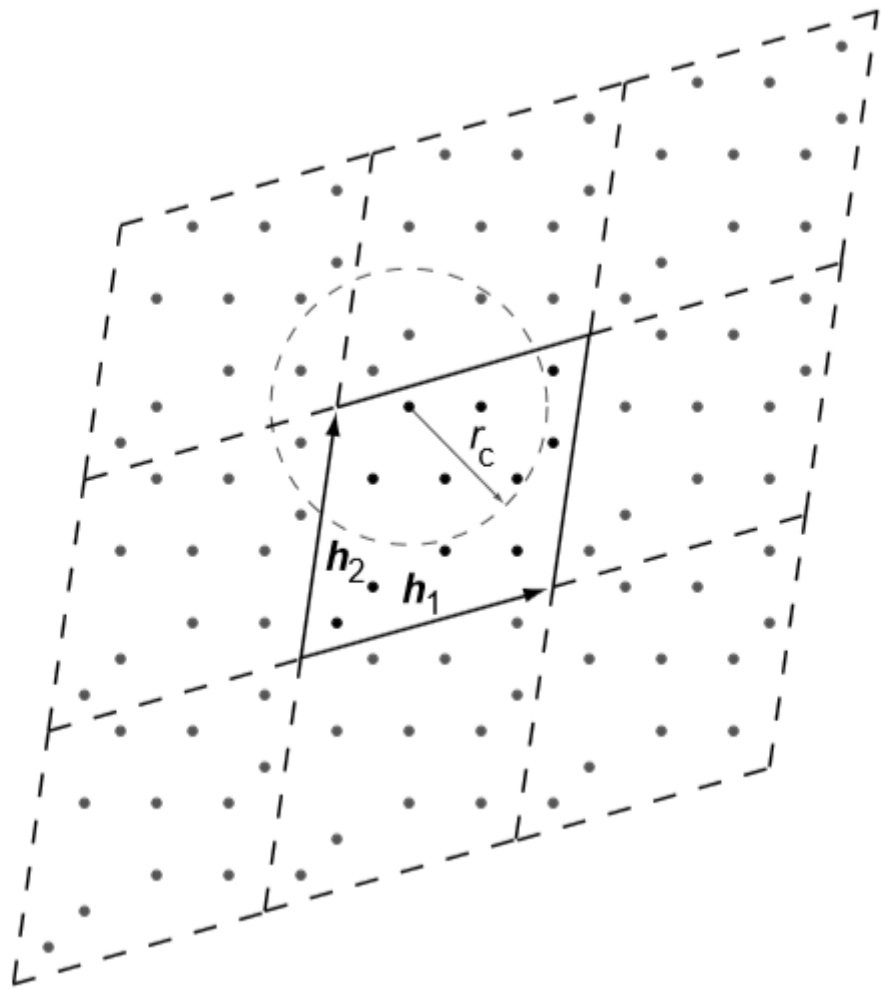


Рисунок 2.1 – Схематичне зображення періодичних граничних умов

Відстежуються траєкторії лише атомів у центральній комірці, що називається суперкоміркою (визначається векторами  $h_1$ ,  $h_2$  і  $h_3$ ), яка в кінцевому підсумку повторюється у всіх трьох напрямках. Атом у суперкомірці може взаємодіяти з іншими атомами в суперкомірці, а також з атомами в суміжних зображеннях суперкомірки.  $r_c$  – потенціал обрізання. При обчисленні взаємодії до уваги беруться тільки ті частинки, які знаходяться на відстані, меншій за потенціал обрізання. Це значно спрощує розрахунки, але розмір розрахункової комірки в напрямках, вздовж яких діють ПГУ, повинен бути більшим за два радіуси обрізання для запобігання впливу частинки на саму себе ж.

В даній роботі на розрахункову комірку вздовж осей Z та X накладались періодичні граничні умови. В напрямку Y граничні умови вимикались, а дві

верхні і дві нижні площини фіксувались для подальшого забезпечення в системі пластичної деформації.

Деформація, яка викликає рух дислокацій в системі, здійснювалась шляхом прикладення до зафіксованих верхніх площин зміщення із заданою швидкістю. В першому випадку абсолютна швидкість зміщення верхньої половини кристалу відносно нижньої становила 23,9 м/с, в другому – 11,9 м/с, в третьому – 2,4 м/с.

Швидкість деформації в кожному випадку відповідала швидкостям деформації в експериментах з лазерною обробкою в режимі модульованої добротності. Так для першого випадку швидкість деформації становила  $2,78 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ , для другого –  $1,39 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ , а для третього –  $2,78 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$ .

## 2.6 Візуалізація результатів моделювання

В даний час найпотужнішою та універсальною безкоштовною програмою для візуалізації траєкторій в моделюванні методом молекулярної динаміки є, мабуть, VMD [49]. Вона заснована на OpenGL, з графічними інтерфейсами, в ній також наявний командний рядок з повними можливостями скриптів. Існує навіть спеціальний синтаксис для вибору підмножин атомів для відображення (включаючи логічні оператори, регулярні вирази тощо). Траєкторії можна відтворювати, аналізувати та легко перетворювати у фільми. Стереопідсилувач повністю підтримується. VMD також може відображати об'ємні набори даних, включаючи карти електронної щільності, електронні орбіталі, та різні типи об'ємних даних. Вони можуть бути виготовлені за допомогою представлень "VolumeSlice" або "Isosurface", кожен з яких надає кілька геометричних стилів візуалізації для перегляду даних, варіювання ізорівнів, позиції площини відрізків і т.д. 1-D, 2-D та 3-D текстури можуть бути нанесені на молекулярні та об'ємні представлення даних для передачі різних типів інформації. Є також багато особливостей для аналізу великих біомолекулярних систем [21].

В нашому випадку результати моделювання записувались в текстовий файл формату `pdb`, який містив номер, тип та координати кожного атома системи. Запис основних файлів з результатами моделювання проводився кожні  $0,12 \cdot 10^{-12}$  с.

Зміна атомних конфігурацій у часі спостерігалась у вигляді слайд-шоу. Це дозволило аналізувати переміщення атомів та визначати швидкість руху дислокацій.

## 2.7 Методика розрахунку параметрів масоперенесення

Для аналізу взаємодії дислокацій, що рухаються, з міжвузельним атомом (МА) проводили виміри коефіцієнта дифузії  $D_i$  (р-ня 2.3) [15] в кожному вибраному координатному напрямку та в об'ємі цілого зразка.

$$D_i = \frac{\sum_i^N \Delta^2}{6 \cdot N \cdot t}, \quad (2.3)$$

де  $N$  - кількість атомів в системі,

$\Delta^2$  - квадрат зміщення атома в заданому напрямку,

$t$  - час дифузії.

При обчисленні  $\Delta^2$  враховувались тільки ті зміщення, які перевищували зміщення, що викликаються тепловими коливаннями атомів. Для ОЦК-гратки такі зміщення (в проекції на вісь  $X$  нашої системи) становлять:  $\sqrt{3/16}$  в напрямку  $[111]$  та  $\sqrt{1/16}$  в двох інших ортогональних напрямках. При цьому, переміщення атомів у верхній половині кристалу, де розміщувались дислокації, не враховувались, оскільки рух дислокацій не несе за собою переміщення маси.

### 3 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

#### 3.1 Рух дислокацій в металах з ОЦК граткою

Розглядається система з об'ємоцентрованою кубічною граткою, в якій наявні дві дислокації, що рухаються та власний міжвузельний атом (рис. 3.1).

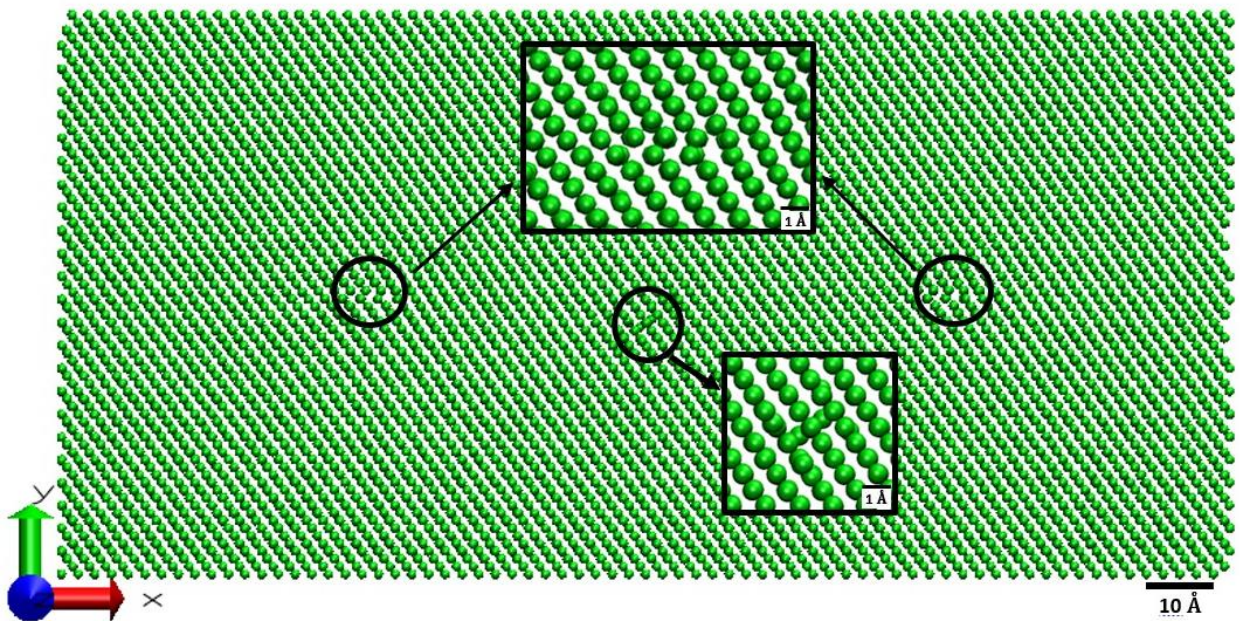


Рисунок 3.1 – Початкове положення системи з двома дислокаціями та міжвузельним атомом за температури 300 К

Вісь X співпадає з напрямком  $[111]$  для ОЦК гратки, що є напрямком найщільнішого пакування в таких структурах. Осі Y та Z, згідно з умовою ортогональності векторів, співпадають з напрямками  $[11\bar{2}]$  та  $[\bar{1}10]$  відповідно.

Площиною ковзання дислокацій є площина  $(11\bar{2})$ , напрямком ковзання –  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ , самі ж екстраплощини розташовуються в площині  $(110)$ .

Щільність дислокацій становила  $6,6 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$ , а вектор Бюргерса 0,25 нм.

Дві верхні та дві нижні атомні площини зафіксовані і для цього напрямку (Y) вимкнено граничні умови. Для напрямків X та Z задано періодичні граничні умови.

Рух дислокацій здійснювався шляхом зміщення верхніх зафіксованих площин. Дослідження проводилось при трьох швидкостях зміщення площин, які імітували три швидкості деформації кристалу (табл. 3.1) та спричиняли рух дислокацій у змодельованому зразку. Сумарне зміщення в кожному випадку дорівнювало величині періоду в напрямку [111] і становило  $2a$  ( $a = 2,866 \text{ \AA}$ ).

Таблиця 3.1 – Швидкість деформації заліза при різних швидкостях зміщення верхніх площин

Швидкість зміщення верхніх площин, м/с	Швидкість деформації, $\text{с}^{-1}$
23,9	$2,78 \cdot 10^9$
11,9	$1,39 \cdot 10^9$
2,4	$2,78 \cdot 10^8$

Швидкість деформації розраховувалась із рівняння Орована для знаходження величини деформації, якщо дислокація пройшла крізь увесь кристал [50]:

$$\varepsilon = \frac{b}{h}, \quad (3.1)$$

де  $\varepsilon$  – величина деформації;

$b$  – вектор Бюргерса;

$h$  – розмір кристалу в напрямку, перпендикулярному площині ковзання дислокації (в нашому випадку, це розмір кристалу в напрямку осі Y).

Сама ж швидкість деформації (р-ня 3.2) – це величина деформації кристалу за час, протягом якого дислокація пройде весь зразок і на ньому утвориться сходинка, рівна за величиною вектору Бюргерса.

$$\dot{\varepsilon} = \frac{b}{h} \cdot \frac{1}{t}, \quad (3.2)$$

де  $t$  - час, протягом якого дислокація пройде весь зразок.

Щільність дислокацій становила  $6,6 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$ , а вектор Бюргерса 0,25 нм.

Отже, в системі забезпечувалась швидкість деформації, що практично відповідає швидкості деформації при лазерній обробці в режимі модульованої добротності.

### **3.2 Взаємодія міжвузельного атому з рухомими дислокаціями**

В ході дослідження з'ясувалось, що в процесі релаксації та нагріву системи до температур 77 К, 300 К і 900 К, дислокації та міжвузельний атом здійснюють коливальні рухи відносно свого положення рівноваги. В процесі руху дислокації та її наближення до міжвузельного атому, напруження, що діють в ядрі дислокацій, впливають на МА, змушуючи його рухатись в бік ядра ближньої дислокації, тобто в область розтягу. Така поведінка МА спостерігається майже в усіх випадках для трьох різних температур.

При високих температурах (900 К) міжвузельний атом не обов'язково захоплюється областю ядра дислокації. В зразку, який піддавався деформації зі швидкістю  $1,39 \cdot 10^9$  спостерігається рух міжвузельного атому під ядром дислокації, проте самим ядром атом не захоплюється і не попадає в площину ковзання дислокації. До того ж МА періодично наближається то до області однієї дислокації, то іншої. Така поведінка МА спричинена більшим вкладом температури в процес масопереносу, ніж механічних напружень. Проте, при таких високих швидкостях деформації, дане явище спостерігається доволі рідко.

Після захоплення МА дислокація продовжує рухатись в площині ковзання, при цьому міжвузельний атом рухається разом з нею. Вигляд дислокації з міжвузельною конфігурацією показано на рисунку 3.2.



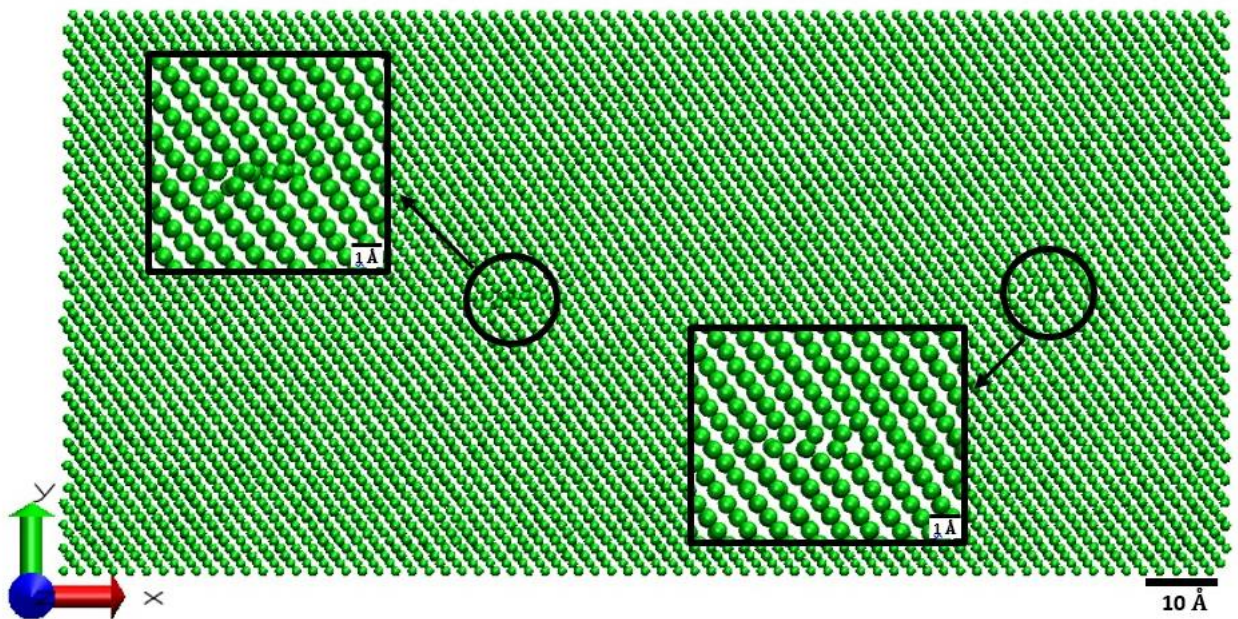


Рисунок 3.2 – Вигляд дислокації з міжвузельною конфігурацією та звичайної дислокації в ОЦК кристалі

Під час наближення МА до ядра дислокації спостерігається деяке сповільнення руху дислокації. Після того, як міжвузельний атом захоплюється ядром, дислокація продовжує свій рух з попередньою швидкістю.

При температурі 77 К вслід за дислокацією з міжвузельною конфігурацією в площині ковзання дислокації спостерігається невелике зміщення атомів зі свого положення рівноваги в бік, протилежний до руху дислокації. Це спричинено тим, що при низьких температурах рухливість атомів значно менша, тому міжвузельний атом, що знаходиться в ядрі дислокації, не встигає дифундувати вздовж напрямку руху дислокації з такою ж швидкістю, як і сама дислокація, яка при цьому зберігає свою швидкість руху внаслідок прикладеного зовнішнього напруження.

### 3.3 Вплив швидкості деформації та температури на швидкість руху дислокацій

Швидкість руху дислокацій визначається багатьма факторами, серед яких є швидкість деформації та температура. Для описаної в даній роботі системи, коли окрім дислокацій в кристалі присутній ще й міжвузельний атом,

доречно розглядати швидкість дислокації з міжвузельним атомом в ядрі та без нього (табл. 3.2).

Швидкість руху дислокацій розраховувалась як відношення відстані до часу, за який цю відстань було подолано:  $v = \Delta l / \Delta t$ .

Таблиця 3.2 – Зміна швидкості руху дислокації з міжвузельним атомом та без нього зі збільшенням температури та швидкості деформації

Температура, К	Швидкість деформації, с <sup>-1</sup>		
	2,78·10 <sup>8</sup>	1,39·10 <sup>9</sup>	2,78·10 <sup>9</sup>
	Швидкість дислокації без міжвузельного атому, м/с		
77	90 ± 10	450 ± 50	750 ± 100
300	80 ± 10	250 ± 50	650 ± 100
900	70 ± 10	200 ± 50	650 ± 100
	Швидкість дислокації з міжвузельним атомом, м/с		
77	90 ± 10	450 ± 50	750 ± 100
300	80 ± 10	400 ± 50	750 ± 100
900	80 ± 10	400 ± 50	650 ± 100

Я видно з табл. 3.2, в системі забезпечувалась допустима швидкість руху дислокацій, яка не перевищує швидкість звуку в залізі, що становить 5850 м/с.

Зі збільшенням швидкості деформації на порядок, швидкість руху дислокацій також зростає в 10 разів.

З підвищенням температури швидкість руху дислокацій дещо зменшується. Це пов'язано зі збільшенням параметра ґратки при високих температурах, внаслідок чого зростає бар'єр Пайерлса та зменшуються модулі пружності.

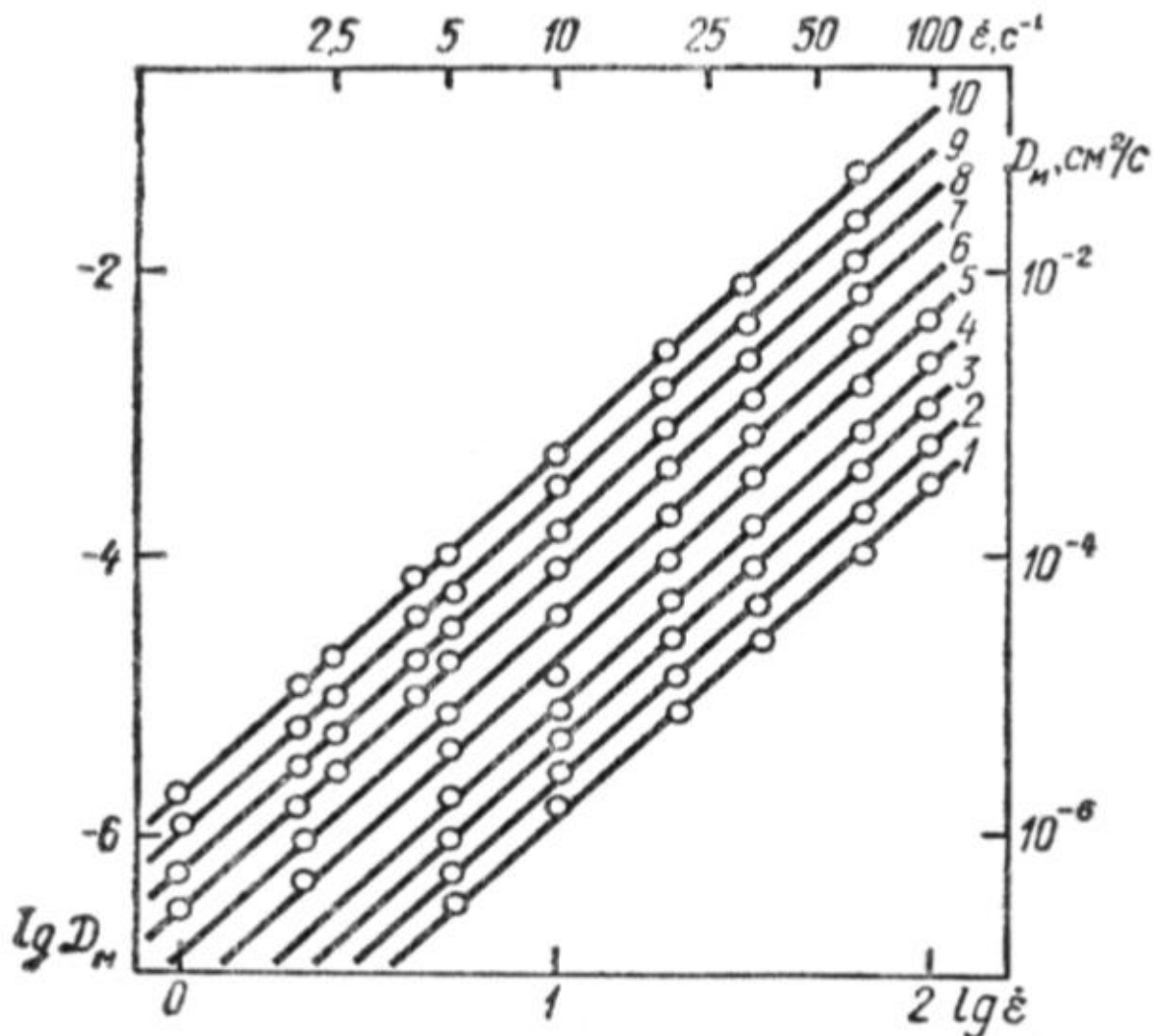
Наявність міжвузельного атому в ядрі дислокації практично не впливає на швидкість руху самої дислокації.



### 3.4 Розрахунок параметрів масоперенесення

Зниження температури дифузійного відпалу приводить до експоненціального зниження рухливості атомів у металі. При імпульсних навантаженнях вплив температури на масоперенос виражений значно слабше. Це дозволяє досліджувати процеси переносу речовини в умовах навантаження, коли термічно активованою дифузією можна зневажити [51].

На рис. 3.3 наведено графік залежності коефіцієнта дифузії від швидкості деформації для заліза.



1 –  $T = 273 \text{ K}$ ; 2 –  $T = 373 \text{ K}$ ; 3 –  $T = 473 \text{ K}$ ; 4 –  $T = 573 \text{ K}$ ; 5 –  $T = 673 \text{ K}$ ;  
6 –  $T = 773 \text{ K}$ ; 7 –  $T = 873 \text{ K}$ ; 8 –  $T = 973 \text{ K}$ ; 9 –  $T = 1073 \text{ K}$ ; 10 –  $T = 1163 \text{ K}$

Рисунок 3.3 – Залежність коефіцієнтів масоперенесення в ОЦК залізі

від швидкості деформації [51]

З рис 3.3 видно, що рухливість власних атомів в  $\alpha$ -залізі зі збільшенням температури в усьому інтервалі швидкостей навантаження однаково зростає.

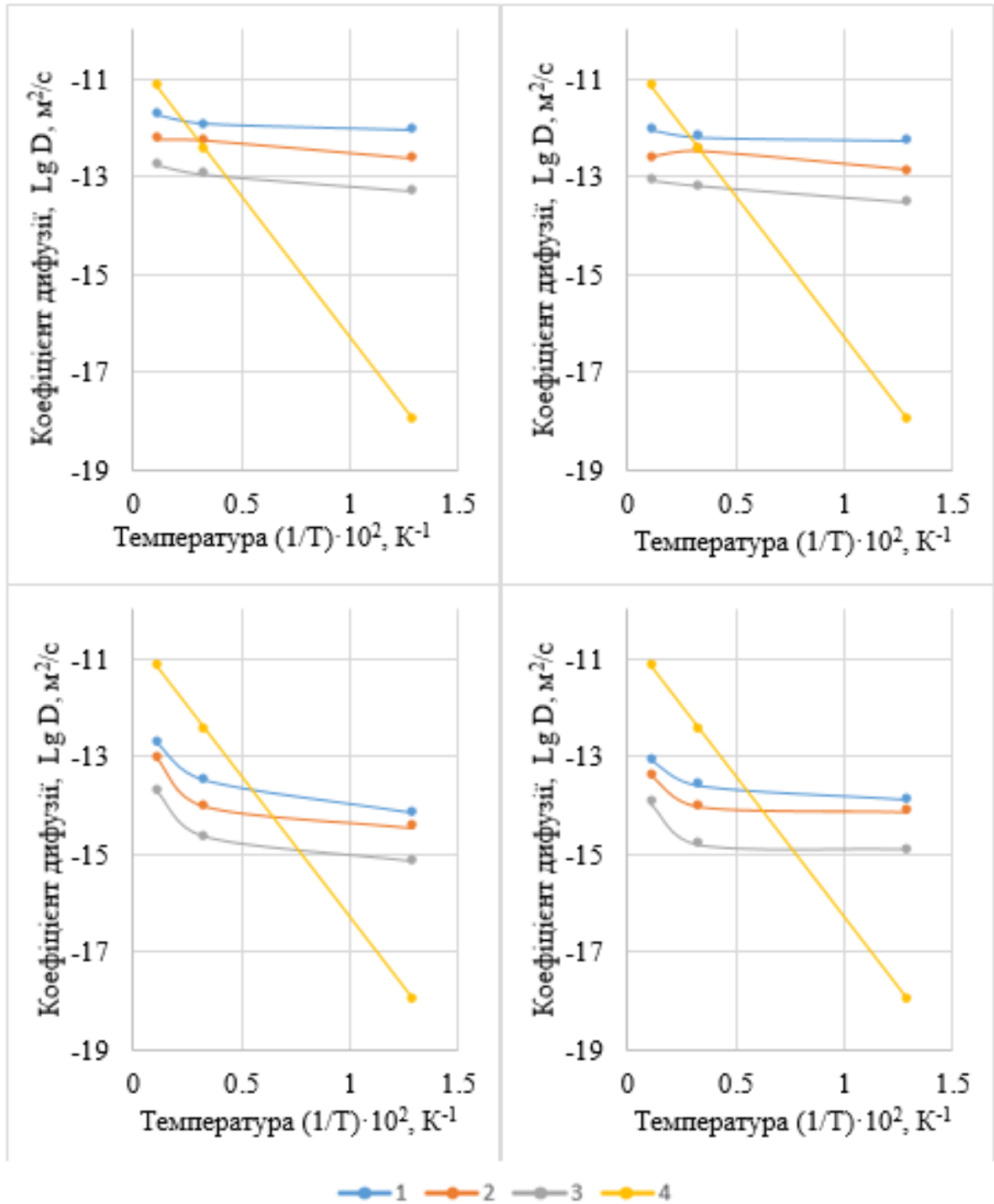
В даній роботі реалізується дифузія за механізмом випадкових блукань при наявності рушійної сили за участю міжвузельних атомів. Для розрахунку коефіцієнтів самодифузії використовували рівняння 2.3.

Варто зазначити, що при високоенергетичних імпульсних впливах величина рушійної сили настільки велика, що внесок механізму випадкових блукань стає малим, при цьому відбувається в основному спрямоване перенесення атомів [51].

### **3.4.1 Вплив температури на коефіцієнт самодифузії**

Коефіцієнт самодифузії в залізі розраховувався, беручи до уваги лише нижню частину кристалу, де є міжвузельний атом та немає дислокацій. На рис. 3.4 показано залежність коефіцієнта самодифузії від температури в об'ємі зразка та окремо в кожному координатному напрямку змодельованої системи.

Як видно з рис. 3.4, з підвищенням температури, розрахований за допомогою молекулярно-динамічної моделі, коефіцієнт дифузії після пластичної деформації зростає мало, в порівнянні з теоретичними даними [52] для недеформованого  $\alpha$ -заліза з міжвузельними атомами в концентрації  $c = 1/2000$ . Тобто, при імпульсній лазерній обробці, вклад температури в процес масоперенесення мінімальний, що підтверджує дані, наведені в [51].



1 – швидкість деформації  $2,78 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ , 1 – швидкість деформації  $1,39 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ , 1 – швидкість деформації  $2,78 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ , 4 – теоретична залежність  $D(T)$  для  $\alpha$ -заліза [50];

а – для всього кристалу; б – в напрямку X; в – в напрямку Y; г – в напрямку Z

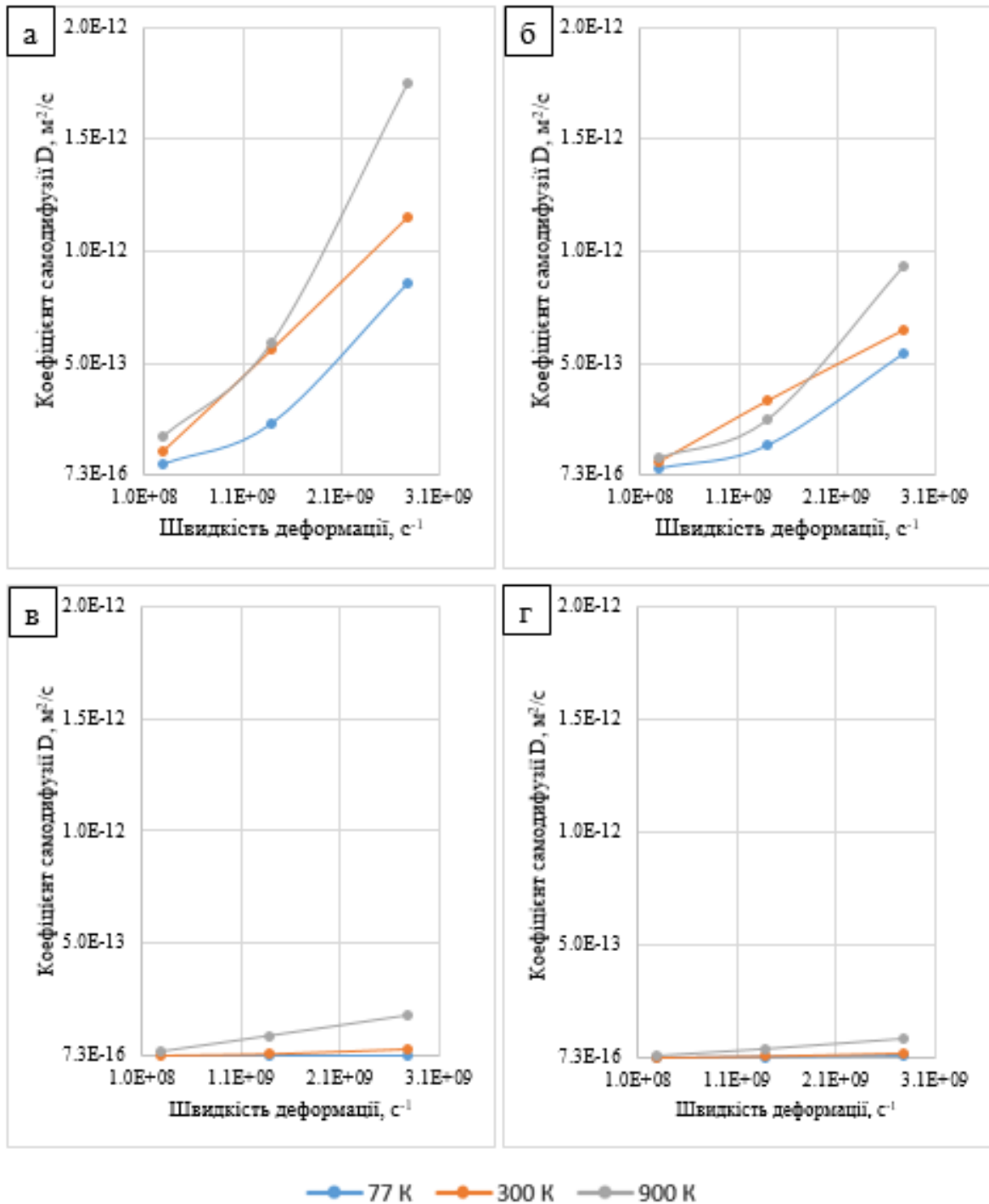
Рисунок 3.4 – Залежність коефіцієнта дифузії від температури

З підвищенням температури від 77 К до 900 К розрахований коефіцієнт самодифузії зростає в 2 рази – в об'ємі зразка та в напрямку  $X$ , в 5 разів – в напрямку  $Z$  та в 27 разів – в напрямку  $Y$ . Велике зростання коефіцієнта дифузії в напрямку  $Y$ , порівняно з двома іншими напрямками, пов'язано з тим, що проекція відстані між сусідніми атомами на вісь  $X$  в цьому напрямку найменша, внаслідок чого зростає ймовірність руху МА вздовж цієї осі. Також при підвищенні температури змінюється ефективний діаметр ядра дислокації, що збільшує ймовірність атомних стрибків у цій області, і, до того ж, як уже було відмічено, при високих температурах атом не завжди захоплюється ядром дислокації.

### **3.4.2 Вплив швидкості деформації на масоперенесення**

Оскільки в моделі імітується пластична деформація, спричинена лазерним випромінюванням, то значний вклад в коефіцієнт самодифузії повинно давати механічне навантаження. Поведінку коефіцієнта самодифузії в  $\alpha$ -залізі зі збільшенням швидкості деформації показано на рис. 3.5.

При кожній з температур (77 К, 300 К, 900 К) міжвузельний атом здійснює рух до ядра дислокації в процесі наближення дислокації до нього, що спричиняє дифузію, зумовлену механічними напруженнями. За умови, коли дислокації закріплені на місці, МА залишається в своєму положенні рівноваги і коефіцієнт самодифузії в такому випадку рівний нулю.



а – для всього кристалу; б – в напрямку X; в – в напрямку Y; г – в напрямку Z

Рисунок 3.5 – Залежність коефіцієнта самодифузії від швидкості деформації

В роботі [53] розраховане методом молекулярної динаміки значення коефіцієнту самодифузії в залізі для міжвузельного механізму після імпульсного впливу становить  $6 \cdot 10^{-12}$  м<sup>2</sup>/с. Отже, отримане нами значення коефіцієнта самодифузії в об'ємі всього кристалу добре узгоджується зі значеннями, отриманими в інших роботах.

Так як в металах, де наявні дислокації і точкові дефекти має місце дислокаційна дифузія, тобто дифузія вздовж ядра дислокації, то розглянемо детальніше значення коефіцієнтів дифузії вздовж осі Z [ $\bar{1}10$ ], яка співпадає з лінією дислокації (табл.3.2).

Таблиця 3.2 – Зміна коефіцієнта дифузії зі швидкістю деформації при різних температурах вздовж осі Z

Температура, К	Швидкість деформації, с <sup>-1</sup>		
	2,78·10 <sup>9</sup>	1,39·10 <sup>9</sup>	2,78·10 <sup>8</sup>
	Коефіцієнт дифузії, м <sup>2</sup> /с		
77	1.26·10 <sup>-14</sup>	7.08·10 <sup>-15</sup>	1.22·10 <sup>-15</sup>
300	2.49·10 <sup>-14</sup>	9.14·10 <sup>-15</sup>	1.51·10 <sup>-15</sup>
900	8.57·10 <sup>-14</sup>	4.12·10 <sup>-14</sup>	1.1·10 <sup>-14</sup>

Значення коефіцієнтів дифузії вздовж осі Y близькі до цих самих значень вздовж осі Z. Проте, слід відзначити, що при низьких температурах (77 К і 300 К) значення D вздовж осі Z при трьох швидкостях деформації в 2 рази перевищує це ж значення вздовж осі Y. Це свідчить про наявність прискореного, в порівнянні з напрямком Y, масопереносу вздовж лінії дислокації.

В напрямку осі X значення коефіцієнта D найбільші, оскільки в цьому напрямку відбувається рух дислокації з МА, отже наявне спрямоване масоперенесення.

Зі збільшенням швидкості деформації в 10 разів, коефіцієнт дифузії у всіх напрямках зростає також в 10 разів.

## 4 РОЗРОБЛЕННЯ СТАРТАП-ПРОЕКТУ

### 4.1 Опис ідеї проекту

Ідея проекту полягає у розробці ефективного та енергозберігаючого методу для прискорення процесів масопереносу в металах (табл. 4.1).

Таблиця 4.1 – Опис ідеї стартап-проекту

Зміст ідеї	Напрямки застосування	Вигоди для користувача
Розробка технології обробки поверхні металів для забезпечення прискореного масопереносу при мінімальних енергетичних затратах.	Машинобудування	Зменшення тривалості дифузійних процесів на ряду з підвищенням ефективності
	Приладобудування	Зменшення енергетичних витрат, зокрема електроенергії
	Авіаційна промисловість	Додаткове зміцнення поверхні в процесі лазерної обробки
	Наукові дослідження	

Зазвичай, дифузійні процеси в твердих тілах – це доволі довготривалі процедури, внаслідок чого обмежується кількість таких процедур за певний час та збільшуються енергетичні витрати для їх реалізації.

В даному проекті пропонується технологія лазерної обробки металевих деталей, яка пришвидшує транспортні процеси в матеріалах, і яка за тривалістю є швидшою та менш енергетично затратною за інші існуючі технології. До того ж ще однією перевагою цього методу є зміцнення поверхні деталей в процесі його реалізації.

### 4.2 Аналіз переваг ідеї проекту

Аналіз потенційних техніко-економічних переваг ідеї порівняно із пропозиціями конкурентів наведено в табл. 4.2.

Конкурент 1 – компанія «Нордекс», Україна. Займається розробкою та виробництвом технологічного устаткування, зокрема виробництвом устаткування для іонного азотування та нітроцементації.

Конкурент 2 – ООО «Резерв НК», Росія. Дана компанія представляє лазерні технології та устаткування.

Конкурент 3 – «Йонітех» ООД – приватна компанія з виробництва устаткування для іонно-плазмового азотування.

Таблиця 4.2 – Визначення сильних, слабких та нейтральних характеристик ідеї проекту

№ п/п	Техніко-економічні характеристики ідеї	Товари/концепції конкурентів			
		Мій проект	Конкурент 1	Конкурент 2	Конкурент 3
1	Тривалість обробки	(15-20) хв.	від декількох годин до декількох днів	(15-20) хв.	від декількох годин до декількох днів
2	Точкова обробка деталей складної форми	доступно	недоступно	доступно	недоступно
3	Зміцнення поверхні	високе	середнє	середнє	середнє
4	Простота реалізації	простий	складний	простий	складний
5	Енергоспоживання	низьке	високе	середнє	високе
6	Технологічна собівартість обробки	низька	висока	середня	висока

Отже, даний вид обробки має певні переваги відносно конкурентів та є доцільним для реалізації на підприємствах і в інших виробничих чи наукових структурах.



### 4.3 Визначення потенційних груп клієнтів

Потенційні групи клієнтів, їх характеристики та вимоги до способу обробки наведено в табл. 4.3.

Таблиця 4.3 – Характеристика потенційних клієнтів стартап-проекту

<b>Потреба, що формує ринок</b>	<b>Цільова аудиторія</b>	<b>Відмінності у поведінці різних потенційних груп клієнтів</b>	<b>Вимоги споживачів до технології</b>
Реалізація процесів масопереносу за короткий проміжок часу та з мінімальними витратами	Підприємства, що займаються машино-, приладотами літакобудуванням, науково-дослідні інститути і інші підприємства, де необхідна обробка металевих виробів	Доцільність обробки певних деталей; можливість реалізації технології.	Швидка обробка; економічна вигода; точність обробки складних поверхонь

Дані таблиці 4.3 свідчать про наявну потребу на ринку в ідеї, що пропонується. Наявна цільова аудиторія, яку може зацікавити дана технологія, і ця технологія задовольняє економічні та технологічні вимоги споживачів.

### 4.4 SWOT-аналіз

Фінальним етапом ринкового аналізу можливостей впровадження проекту є складання SWOT-аналізу [54] (матриці аналізу сильних (Strength) та слабких (Weak) сторін, загроз (Troubles) та можливостей (Opportunities) (табл. 4.4).

Таблиця 4.4 – SWOT-аналіз стартап-проекту

<p><b>Сильні сторони:</b> висока ефективність дифузійних процесів; малі затрати часу та електроенергії; низька трудомісткість; висока точність обробки складних деталей; можливість автоматизації процесу; зміцнення поверхні.</p>	<p><b>Слабкі сторони:</b> порівняно висока вартість устаткування.</p>
<p><b>Можливості:</b> вдосконалення технології з часом; розширення галузі її застосування.</p>	<p><b>Загрози:</b> нестабільна економічна та політична ситуація; зменшення попиту; зростання вартості електроенергії.</p>

Виходячи зі SWOT-аналізу, технологія має багато сильних сторін, які роблять її привабливою для потенційних клієнтів, та є можливості для розширення галузі її застосування і вдосконалення з розвитком науково-технічного прогресу.

#### 4.5 Формування маркетингової концепції товару

Одним із кроків в розробленні маркетингової програми стартап-проекту є формування маркетингової концепції товару. Для цього аналізується конкурентоспроможність товару.

Ключові переваги запропонованого проекту наведено в табл. 4.5.

Таблиця 4.5 – Визначення ключових переваг концепції потенційного товару

№ п/п	Потреба	Вигода, яку пропонує технологія	Ключові переваги над конкурентами
1	Заощадження енергетичних та фінансових ресурсів	Технологія потребує мінімальних затрат енергії та є економічно доступною	Менш енергетично затратна та дешевша за інші технології
2	Заощадження часу	Проста в реалізації та швидка	Швидша за більшість існуючих технологій
3	Можливість обробки складних конструкцій	Можна з високою точністю обробляти ділянки складних конструкцій	Можна обробляти окремі частини цілісної деталі
4	Зміцнення поверхні деталей	В процесі обробки відбувається зміцнення обробленої поверхні	Відбувається дислокаційне зміцнення

Отже, запропонована технологія задовольняє потреби потенційних клієнтів та має значні переваги над конкурентними технологіями.

## 5 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

Законодавство України про охорону праці складається з Закону України «Про охорону праці», Кодексу законів про працю України, Закону України "Про загальнообов'язкове державне соціальне страхування від нещасного випадку на виробництві та професійного захворювання, які спричинили втрату працездатності".

Основоположним документом в галузі охорони праці є Закон України «Про охорону праці» (ст. 13, ст.14 та ст. 15), який визначає основні положення щодо реалізації конституційного права працівників на охорону їх життя і здоров'я у процесі трудової діяльності [55].

Охорона праці – система правових, соціально-економічних, організаційно-технічних, санітарно-гігієнічних і лікувально-профілактичних заходів та засобів, спрямованих на збереження життя, здоров'я і працездатності людини в процесі трудової діяльності [55].

Виходячи з того, що в житті, а тим більше у виробничому процесі, абсолютної безпеки не існує, нерозумно було б вимагати від реального виробництва повного викорінення травматизму, виключення можливості будь-якого захворювання. Але реальним і розумним є ставити питання про зведення до мінімуму впливу об'єктивно існуючих виробничих небезпек. Цю задачу вирішує охорона праці.

Метою даного розділу є аналіз небезпечних та шкідливих чинників, які можуть виникнути в процесі дослідження впливу швидкості руху крайових дислокацій на взаємодію з міжвузельними атомами в металах, умов, що можуть спричинити травмування організму людини і розробка заходів та засобів щодо їх усунення.

При виконанні даної НДР необхідно проаналізувати наступні чинники: мікроклімат в приміщенні, освітлення, електричний струм, випромінювання від комп'ютера, шум та вібрації, пожежонебезпека.

### 5.1 Аналіз параметрів приміщення та мікроклімату

Дослідження виконувалось в Інституті металофізики ім. Г. В. Курдюмова у відділі № 50 Фізики атомних транспортних процесів, лабораторія № 112. Розміри приміщення наведено в табл. 5.1.

Таблиця 5.1 – Розміри робочого приміщення

Параметр	Розмір, м
Розміри лабораторії	
Довжина, а	6
Ширина, b	4
Висота, с	4
Розміри вікон	
Ширина	1,25
Висота	2,5

Таким чином площа та об'єм приміщення становлять:

$$\text{Площа: } S = a \times b = 6 \times 4 = 24 \text{ м}^2;$$

$$\text{Об'єм: } V = a \times b \times c = 6 \times 4 \times 4 = 96 \text{ м}^3.$$

Схематичне зображення лабораторії, а також розташування предметів та обладнання показано на рис. 5.1.

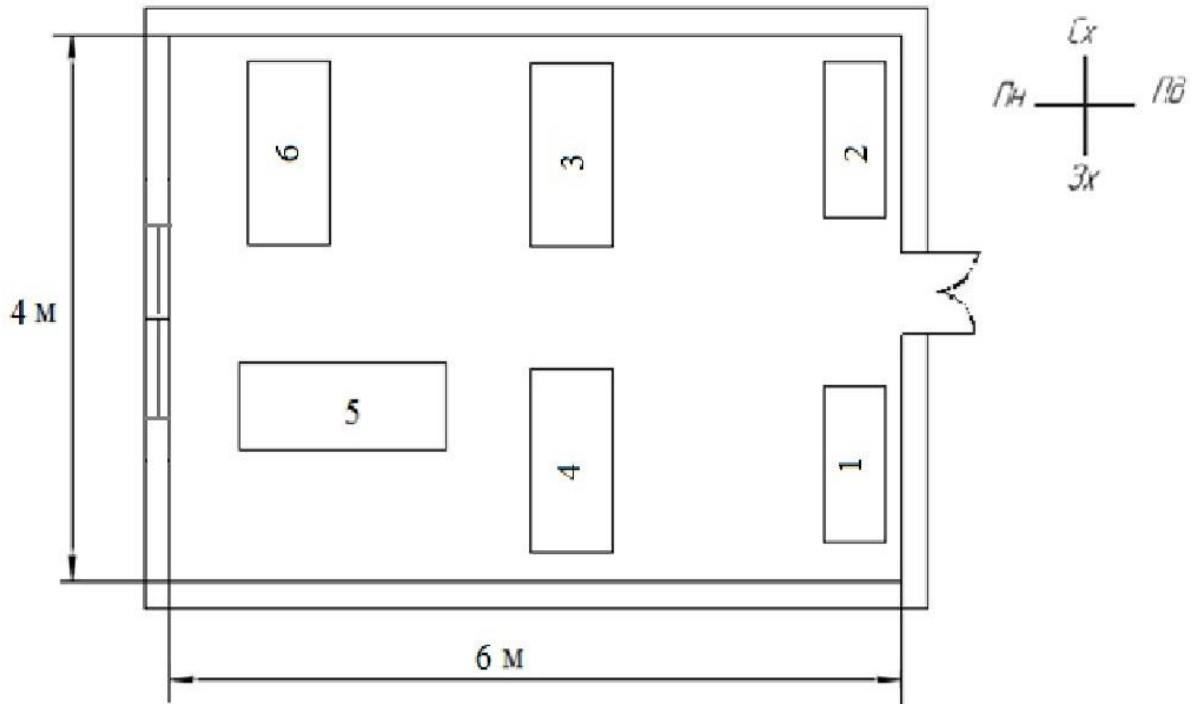
Згідно з ДСанПіН 3.3.2 - 007 - 98, на одну людину повинно припадати не менше 6 м<sup>2</sup> площі та 20 м<sup>3</sup> об'єму [56].

Для нашого приміщення, в якому працюють троє людей, ці показники становлять:

$$\text{Площа, що приходить на одну людину: } S^1 = 8 \text{ м}^2;$$

$$\text{Об'єм, що приходить на одну людину: } V^1 = 32 \text{ м}^3.$$

Отже, дані показники задовольняють норму.



1,2 – шафи; 3 – робоче місце керівника НДР; 4,5 – столи; 6 – комп'ютер  
(робоче місце)

Рисунок 5.1 – Схема лабораторного приміщення №112

Для забезпечення оптимального мікроклімату «Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень» ДСН 3.3.6.042-99 встановлюють оптимальну і допустиму температури, відносну вологість та швидкість руху повітря в робочій зоні в залежності від пори року та категорії важкості робіт [57].

Згідно з ДСН 3.3.6.042-99 категорія важкості робіт – Іб (роботи, що виконуються сидячи, стоячи або пов'язані з ходінням та супроводжуються деяким фізичним напруженням). Витрати енергії при цьому складають 141 Вт - 175 Вт (121 ккал/год - 150 ккал/год.).

Таблиця 5.2 – Параметри мікроклімату в лабораторному приміщенні №112

Період року	Температура повітря, °С		Відносна вологість, %		Швидкість руху повітря, м/с	
	Виміряна	Допустима	Виміряна	Допустима	Виміряна	Допустима
Холодний	21	24...20	45	75	0,1	не більше 0,2
Теплий	23	28...21	50	55 при 28°С; 60 при 27°С; 65 при 26°С; 70 при 25°С; 75 при 24°С і нижче	0,2	0,3...0,1

Отже параметри мікроклімату даного виробничого приміщення відповідають допустимим санітарним нормам, встановлених для постійних робочих приміщень та наведених у таблиці 2 ДСН 3.3.6.042-99 [57].

## 5.2 Аналіз освітленості приміщення

Залежно від джерел світла освітлення може бути природним, що створюється прямими сонячними променями та розсіяним світлом небосхилу; штучним що створюється електричними джерелами світла та суміщеним, при якому недостатнє за нормами природне освітлення доповнюється штучним.

У лабораторії здійснюється природне бокове освітлення. Зовнішнє освітлення при небі вкритому хмарами становить 10000 лк.

Відстань від вікна до місця основної роботи складає 2 м. Робота з ПК відноситься до роботи високої точності. Освітлення лабораторії суміщене (природне та штучне) і відповідає встановленому ДБН В.2.5.28-2006 [58]. Для місцевого освітлення використовуються лампи розжарювання, для загального – люмінесцентні ЛБ-40 (24 одиниці у лабораторії).

### 5.2.1 Розрахунок природного освітлення

Основне розрахункове рівняння при боковому природному освітленні має вигляд [58]:

$$\frac{100 \cdot S_0}{S_n} = \frac{(e \cdot K_3 \cdot \eta_0 \cdot K_{\text{буд}})}{\tau_0 \cdot r_1}, \quad (5.1)$$

де  $e$  – фактичне значення КПО;

$S_0$  – площа вікон;

$S_n$  – площа підлоги;

$K_3$  – коефіцієнт запасу, який приймається згідно табл. 3 [58]. Для приміщень з нормальними умовами середовища (кабінети, навчальні, житлові кімнати, лабораторії, читальні зали) дорівнює 1;

$\eta_0$  – світлова характеристика вікон (визначається з табл. Л.1 [58]);

$\tau_0$  – загальний коефіцієнт світлопроникнення для бокового освітлення;

$K_{\text{буд}}$  – коефіцієнт, який враховує затінювання вікон протилежними будинками, визначається з табл. Л.2 [58];

$r_1$  – коефіцієнт, який враховує підвищення КПО при боковому освітленні завдяки світлу, відбитого від поверхонь приміщення.

В даному випадку  $\eta_0 = 34$  тому, що відношення довжини до глибини приміщення:  $4/6 = 0,6$  (найближче 0,5). Відношення глибини приміщення до його висоти від рівня умовної робочої поверхні до верху вікна:  $6/2,5 = 2,4$ ; висота верху вікна відносно робочої поверхні 2,5 м. Умовна робоча поверхня на рівні підвіконника.

$\tau_0$  визначається за формулою:

$$\tau_0 = \tau_1 \cdot \tau_2 \cdot \tau_3 \cdot \tau_4, \quad (5.2)$$

де  $\tau_1$  – коефіцієнт світлопропускання матеріалу, який визначається з табл. Л.3. В даному випадку 0,8, оскільки в лабораторії склопакет;



$\tau_2$  – коефіцієнт, який враховує втрати світла за рахунок віконних перетинів, який визначається за табл. Л.3 [58]. В даному випадку 0,7, оскільки рама дерев'яна, спарена;

$\tau_3$  – коефіцієнт, який враховує втрати світла в несучих конструкціях і визначається за табл. Л.3 [58] (при боковому освітленні  $\tau_3 = 1$ );

$\tau_4$  – коефіцієнт, який враховує втрати світла за рахунок сонцезахисних пристроїв і визначається з табл. Л.4 [58]. Оскільки в лабораторії присутні регулюючі жалюзі, що складаються, то – 1.

Отже,  $\tau_0 = 0,56$ .

$K_{\text{буд}}$  в даному випадку становить 1,2 тому, що:

$$P/H_{\text{буд}} = 30/18 = 1,7, \quad (5.3)$$

де  $P$  – відстань між двома будинками;

$H_{\text{буд}}$  – висота розміщення карнизу протилежного будинку над підвіконником вікна, що розглядається.

Значення коефіцієнта  $r_1$  визначається за табл. Л.5 [58].

$$\rho_{\text{стелі}} = 80\%$$

$$S_{\text{стелі}} = 24 \text{ м}^2$$

$$\rho_{\text{стін}} = 50\%$$

$$S_{\text{стін}} = 76,88 \text{ м}^2$$

$$\rho_{\text{підлоги}} = 30\%$$

$$S_{\text{підлоги}} = 24 \text{ м}^2$$

$$\rho_{\text{ср}} = \frac{\rho_{\text{стелі}} \cdot S_{\text{стелі}} + \rho_{\text{стін}} \cdot S_{\text{стін}} + \rho_{\text{підлоги}} \cdot S_{\text{підлоги}}}{S_{\text{стелі}} + S_{\text{стін}} + S_{\text{підлоги}}}, \quad (5.4)$$

$$\rho_{\text{ср}} = \frac{0,8 \cdot 24 + 0,5 \cdot 76,88 + 0,3 \cdot 24}{24 + 76,88 + 24} = 0,52 \approx 0,5$$

Відношення відстані розрахункової крапки від зовнішньої стіни до глибини приміщення дорівнює 0,33.

Згідно таблиці Л.5 [58]:  $r_1 \sim 1,2$ . З рівняння (5.1) знайдемо  $e$ :

$$e = \frac{100 \cdot S_0 \cdot \tau_0 \cdot r_1}{S_n \cdot K_3 \cdot \eta_0 \cdot K_{\text{буд}}}, \quad (5.5)$$

Площа вікна дорівнює:  $S_{\text{вікна}} = a \cdot b = 1,25 \cdot 2,5 = 3,125 \text{ м}^2$ . Підставивши всі значення до формули (5.5), отримаємо:

$$e = \frac{100 \cdot 3,125 \cdot 0,56 \cdot 1,2}{24 \cdot 1 \cdot 1,2 \cdot 34} = 0,2.$$

Розрахуємо нормоване значення КПО,  $e_n$  для нашого приміщення, за формулою:

$$e_n = e_H \cdot m_n, \quad (5.6)$$

де  $e_H$  – значення КПО за табл. 1 та 2 [58]. Для зорових робіт високої точності  $e_H$  становить 1,2;

$m_n$  – коефіцієнт світлового клімату за табл. 4 [58].  $m_n$  для північної орієнтації вікон становить 0,9.

$$e_n = 1,2 \cdot 0,9 = 1,08$$

З розрахунків видно, що природне освітлення не достатнє, тому для забезпечення нормальної освітленості приміщення на кожному столі потрібно встановити місцеве освітлення. В разі невідповідності освітлення встановленим нормам, у працівників при тривалій роботі виникають послаблення зору, головні болі, розсіяння уваги, що в свою чергу може призвести до неточностей у виконанні роботи.

### 5.2.2 Розрахунок штучного освітлення

При штучному освітленні нормативною величиною є абсолютне значення освітленості, яке залежить від характеристики зорової праці та системи освітлення (загальне, комбіноване). Розрахунок освітлювальної системи може бути виконано різними способами, які базуються на двох основних методах розрахунку: за світловим потоком і точковий. Найбільш розповсюджений в проектній практиці розрахунок за методом коефіцієнта використання потоку світла. Цей метод використовується для розрахунку загального рівномірного освітлення і дає змогу визначити світловий потік джерел світла, необхідний для створення нормованого освітлення розрахункової горизонтальної площини. Цим методом враховується прямий та відбитий (від стелі, стін та підлоги) потік світла [59]. В даній роботі використаємо метод світлового потоку. Основне розрахункове рівняння має вигляд [58]:

$$F = \frac{E \cdot S \cdot K \cdot Z}{N \cdot n \cdot \eta}, \quad (5.7)$$

де  $F$  – світловий потік джерела світла, лм;

$E$  – нормована освітленість, лк;

$S$  – площа приміщення, м<sup>2</sup>;

$K$  – коефіцієнт запасу, що враховує зниження освітленості в результаті забруднення та старіння ламп;

$Z$  – коефіцієнт нерівномірності освітлення;

$N$  – кількість світильників;

$n$  – кількість ламп у світильнику;

$\eta$  – коефіцієнт використання світлового потоку.

Коефіцієнт використання світлового потоку  $\eta$  визначається за світлотехнічними таблицями [60] залежно від показника приміщення  $i$ ,

коефіцієнтів відбиття стін та стелі. Показник приміщення  $i$  вираховується за формулою:

$$i = \frac{a \cdot b}{h \cdot (a + b)}, \quad (5.8)$$

де  $a$  і  $b$  – ширина і довжина приміщення, м;

$h$  – висота світильника над робочою поверхнею, м.

$$i = \frac{6 \cdot 4}{4 \cdot (6 + 4)} = 0,6$$

Користуючись даними таблиці, за умовою, що:  $\rho_{\text{стелі}} = 80\%$ ,  $\rho_{\text{стін}} = 50\%$ , знаходимо:  $\eta = 37\%$ , або 0,37.

З рівняння (5.7) знаходимо  $E$ :

$$E = \frac{F \cdot N \cdot n \cdot \eta}{K \cdot S \cdot Z}, \quad (5.9)$$

де  $F$  для ламп ЛБ = 3200 лм;

$K$  для ламп ЛБ становить 1,5.

$Z = 1,1$  для люмінесцентних ламп;

$N = 6$  шт.;

$n = 2$  шт.;

$\eta = 0,37$ ;

$S = 24 \text{ м}^2$ .

$$E = \frac{3200 \cdot 6 \cdot 2 \cdot 0,37}{1,5 \cdot 24 \cdot 1,1} = 359 \text{ лк.}$$

Згідно з табл. 2 ДБН В.2.5–28–2006 норма освітлення становить 300 лк. Отримане значення  $E$  перевищує норму тобто, штучне освітлення є достатнім.

### **5.3 Виробничі випромінювання**

Дані про виробничі випромінювання нормуються документом: "Норми радіаційної безпеки України (НРБУ-97)" [61].

#### **5.3.1 Випромінювання від комп'ютера**

При роботі з ЕОМ, яка входить в устаткування, виникає небезпека впливу на організм робітника ультрафіолетового випромінювання та електростатичного поля.

Враховуючи що робота більшою частиною проводиться за ЕОМ, запропоновано щоб час роботи за монітором не перевищував 4 години за зміну з технологічними перервами.

### **5.4 Виявлення та аналіз наявності шуму, вібрації, інфра- та ультразвуку**

Рівні шуму та вібрації на робочих місцях осіб, що працюють з ПК, визначаються відповідно до ДСанПіН 3.3.2.007-98 [56]. Для забезпечення дотримання допустимих рівнів шуму на робочих місцях застосовуються засоби звукопоглинання, вибір яких обґрунтовується спеціальними інженерно-акустичними розрахунками (п. 3.3.3 ДСанПіН 3.3.2.007-98).

Перелік організаційно-технічних заходів щодо обмеження несприятливого впливу шуму та вібрації на працюючих наведено в ДСН 2.3.6.037-99 [62] та ДСН 3.3.6.039-99 [63], серед яких зменшення шуму та вібрації на шляху розповсюдження засобами ізоляції та поглинання, наприклад, за рахунок використання гумових, поролонових, інших шумо- чи вібропоглинаючих матеріалів, або інших матеріалів аналогічного призначення, що дозволені для оздоблення приміщень органами державного санітарно-епідеміологічного нагляду.

## 5.5 Електробезпека

При роботі за комп'ютером, відповідно до розд. VI Правил № 65 щодня перед початком роботи необхідно очищати монітор від пилу та інших забруднень. Після закінчення роботи персональний комп'ютер і периферійні пристрої повинні бути відключені від електричної мережі. У разі виникнення аварійної ситуації необхідно негайно відключити персональний комп'ютер і периферійні пристрої від електричної мережі [64].

Персональні комп'ютери, периферійні пристрої повинні підключатися до електромережі тільки за допомогою справних штепсельних з'єднань і електророзеток заводського виготовлення (п. 2.9 Правил № 65). Штепсельні з'єднання та електророзетки, окрім контактів фазового та нульового робочого провідників, повинні мати спеціальні контакти для підключення нульового захисного провідника. Конструкція їх має бути такою, щоб приєднання нульового захисного провідника відбувалося раніше, ніж приєднання фазового та нульового робочого провідників. Порядок роз'єднання при відключенні має бути зворотнім. Необхідно унеможливити з'єднання контактів фазових провідників з контактами нульового захисного провідника. Неприпустимим є підключення комп'ютерів, периферійних пристроїв до звичайної двохпровідної електромережі, в тому числі — з використанням перехідних пристроїв. Є неприпустимими:

- експлуатація кабелів та проводів з пошкодженою або такою, що втратила захисні властивості за час експлуатації, ізоляцією;
- застосування саморобних подовжувачів, застосування для опалення приміщення нестандартного (саморобного) електронагрівального обладнання або ламп розжарювання;
- користування пошкодженими розетками, розгалужувальними та з'єднувальними коробками, вимикачами та іншими електроприборами, а також лампами, скло яких має сліди затемнення або випинання;
- використання електроапаратури та приладів в умовах, що не відповідають вказівкам (рекомендаціям) підприємств-виготовлювачів.

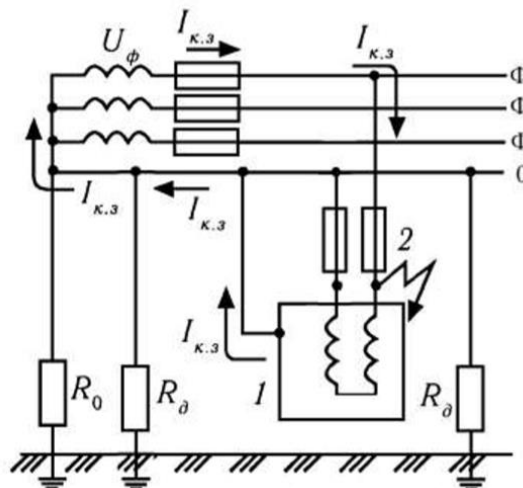
### 5.5.1 Розрахунок заземлення

Конструктивними заходами безпеки, призначеними для запобігання можливості дотику людини до струмопровідних частин комп'ютерів, є захисні корпуси моніторів і системних блоків.

Відповідно до ГОСТ 12.1.009-76 [65], захисне заземлення – це навмисне електричне з'єднання з землею чи її еквівалентом металевих не струмопровідних частин, які можуть опинитися під напругою. В електричних мережах до 1000 В із глухозаземленою нейтраллю (зазвичай це мережі з напругою 660/380 В, 380/220 В і 220/127 В) застосовується занулення.

Занулення – це заплановане з'єднання неструмопровідних частин електрообладнання з нульовим провідником, які можуть опинитись під напругою в результаті пошкодження ізоляції.

Мета занулення – перетворити струм пробую, який виникає у випадку пошкодження ізоляції у струм короткого замикання (КЗ), і відімкнути електрообладнання від мережі живлення. Принципова схема занулення показана на рис. 5.2.



1 – корпус споживача електроенергії; 2 – апарат захисту від струмів короткого замикання (запобіжники, автомати тощо);  $R_0$  – опір нейтралі джерела живлення (робоче заземлення);  $R_\delta$  - повторне заземлення нульового проводу;  $I_{к.з}$  – струм короткого замикання

Рисунок 5.2 - Принципова схема занулення ПК в трьохфазній мережі

Згідно з ГОСТ 12.1.030-81 («Електробезпека. Захисне заземлення. Занулення») [66], граничне допустиме значення опору заземлення для установки з напругою живлення до 1000 В з ізольованою нейтраллю складає  $R_n < 4,00$  Ом. Визначимо розрахунковий питомий опір землі за формулою:

$$\rho = \rho_{\text{вим}} \cdot \psi, \quad (5.10)$$

де  $\psi$  - розрахунковий кліматичний коефіцієнт питомого опору ґрунту (1,5);

$\rho_{\text{вим}}$  - питомий електричний опір ґрунту (100 Ом·м).

Отже,  $\rho = 100 \cdot 1,5 = 150$  Ом·м.

Опір одного заземлювача визначається формулою:

$$R_{з1} = \frac{\rho}{2\pi l} \cdot \left[ \ln\left(\frac{2l}{d}\right) + \frac{l}{2} \cdot \ln\left(\frac{4t+l}{4t-l}\right) \right], \text{ Ом}, \quad (5.11)$$

де  $l$  – довжина труби, 2 м;

$d$  – зовнішній діаметр труби, 0,06 м;

$t$  – глибина закладання заземлювача, 1,8 м.

Тобто,  $R_{з1} = 53,4$  Ом. Визначаємо кількість заземлювачів:

$$N = \frac{R_{з1}}{R_{ш} \cdot \eta_e}, \quad (5.12)$$

де  $\eta_e$  – коефіцієнт використання електродів, який враховує їх взаємне екранування, прийmemo його рівним, згідно табл., 0,6 ( $a / l_{\text{тр}} = 2$ );

$R_{ш}$  – припустимий опір всіх вертикальних електродів по нормам, 3,5 Ом.

Отримуємо  $N = 26$  заземлювачів.

Визначимо довжину горизонтального електроду, що застосовується для зв'язку вертикальних електродів враховуючи, що вертикальні електроди розташовані в ряд:



$$L = 1,05 \cdot a \cdot (N - 1) = 1,05 \cdot 4 \cdot (26 - 1) = 105 \text{ м}, \quad (5.13)$$

Опір розтіканню струму цього електроду визначаємо за формулою:

$$R_r = \frac{\rho}{2\pi \cdot L} \cdot \ln\left(\frac{2L^2}{d \cdot t_0}\right), \quad (5.14)$$

$$R_r = \frac{150}{2 \cdot 3,14 \cdot 105} \cdot \ln\left(\frac{2 \cdot 105^2}{0,06 \cdot 0,8}\right) = 2,96 \text{ Ом}$$

Враховуючи все це, еквівалентний опір розтікання струму штучного заземлювача визначається за формулою:

$$R'_{31} = \frac{R_{31} \cdot R_r}{R_{31} \cdot \eta_r + R_r \cdot N \cdot \eta_B}, \quad (5.15)$$

де  $\eta_r$  – коефіцієнт використання горизонтального електроду з врахуванням вертикальних електродів; визначаємо, що  $\eta_r = 0,5$ .

$$R'_{31} = \frac{53,4 \cdot 2,96}{53,4 \cdot 0,5 + 2,96 \cdot 26 \cdot 0,6} = 2,16 \text{ Ом},$$

З розрахунку можна бачити, що  $R'_{31} < 4 \text{ Ом}$ , тобто опір, розрахований вище, повністю відповідає ГОСТ 12.1.030-81 [66].

## 5.6 Забезпечення безпеки та запобігання надзвичайним ситуаціям

Під час виконання науково-дослідницької роботи можливе виникнення наступних надзвичайних ситуацій: пожежа, вибух, землетрус, аварія на електроенергетичних системах, раптове руйнування будівлі.

До 1 класу надзвичайних ситуацій (ситуацій техногенного характеру) відноситься пожежа.

Відповідно до таблиці 1 ДСТУ Б. В.1.1-36:2016 [67] лабораторія за пожежною безпекою належить до категорії В, тому що в ній знаходяться тверді та важко горючі матеріали, та не відноситься до категорій А та Б.

У лабораторії № 112 найнебезпечніші місця – місце, де розміщено комп'ютерну техніку та місця де прокладена електропроводка. Також горіти можуть столи, шафи з книгами та іншими паперами. Виникнення пожеж в лабораторіях можливе за наступних причин: порушення технологічного режиму; несправність електроустаткування; необережне поводження з вогнем; конструктивні недоліки устаткування; неправильне користування устаткуванням.

Для запобігання пожеж необхідно виключити перераховані недоліки і строго дотримуватись заходів і засобів протипожежної безпеки. Засобами виявлення й оповіщення про пожежу є автоматичні датчики-сигналізатори про пожежу типу ДТП, що реагують на підвищення температури.

У випадку пожежі на електроустановці, що знаходиться під напругою, виникле полум'я не гаситься водою, а використовується вуглекислотний вогнегасник. На випадок пожежі в лабораторії є водопровід, вогнегасник вуглекислотноброметилловий ОУБ-3 (ГОСТ 111564-65), а в коридорах – шухляди з піском, вогнегасники ОХП-10, ОП-1Б, пожежні крани.

Приміщення обладнане пожежною сигналізацією автоматичної дії комбінованого типу (оповісник КИ-1).

План евакуації на випадок виникнення пожежі наведено на рис.5.3.

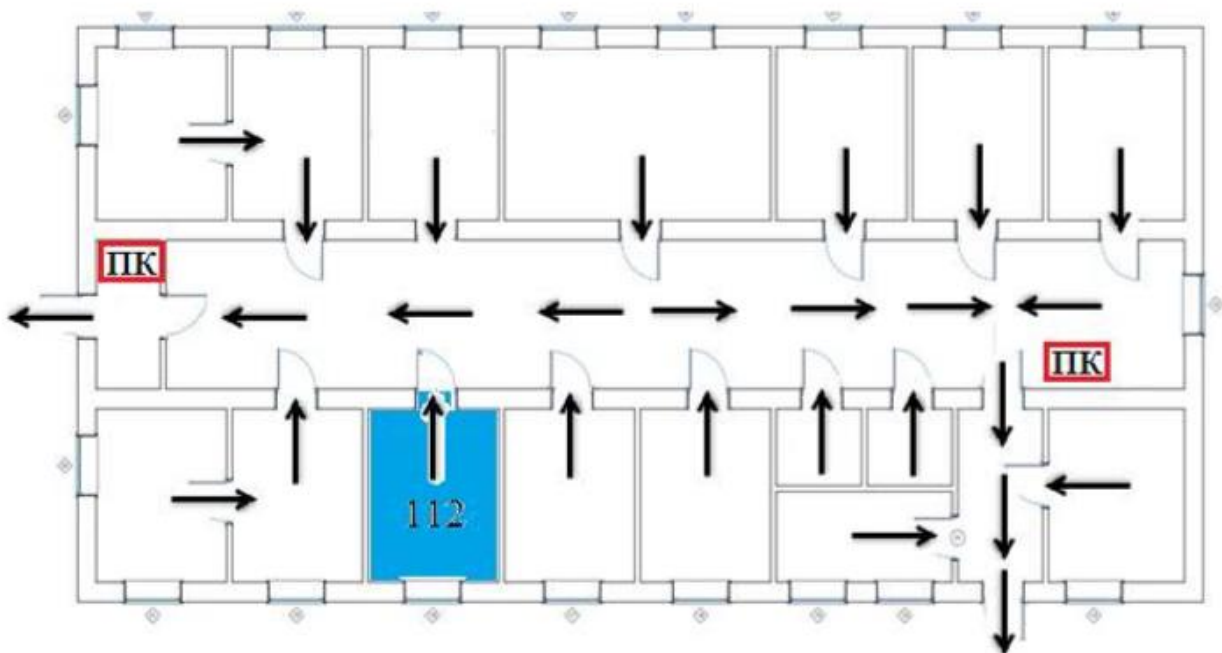


Рисунок 5.3 – План евакуації із приміщення

Основними заходами з пожежної безпеки є регулярна перевірка працездатності засобів гасіння пожежі і систем пожежної сигналізації; перевірка справності електричної проводки; щорічне випробування опору ізоляції підвищеною напругою (близько 500 В); обережне поводження з легкоплавкими речовинами.

## ВИСНОВКИ

1. За допомогою методу молекулярної динаміки створено тривимірну модель для дослідження руху дислокацій, їх взаємодії з міжвузельними атомами та процесів масопереносу в кристалі з об'ємоцентрованою кубічною граткою.

2. В процесі руху дислокації та її наближення до міжвузельного атому, МА підтягується до ядра дислокації та фіксується полем її напружень. Подальший рух дислокації здійснюється уже разом з міжвузельним атомом в ядрі, тобто сама дислокація є рухомою пасткою для точкового дефекту.

3. Встановлено, що зі збільшенням швидкості деформації на порядок, швидкість руху дислокацій зростає на таку ж величину. При підвищенні температури від 77 К до 900 К швидкість руху дислокацій зменшується на 10 м/с – 100 м/с. Це пов'язано зі збільшенням параметра гратки при високих температурах, внаслідок чого зростає бар'єр Пайерлса та зменшуються модулі пружності.

4. Результати дослідження коефіцієнту самодифузії показали, що, зі збільшенням температури від 77 К до 900 К, коефіцієнт самодифузії зростає в 2 рази, в той час як при збільшенні швидкості деформації в 10 разів, коефіцієнт самодифузії зростає на порядок. Отже, при великих швидкостях деформації, вплив температури на процеси масопереносу виражений в значно меншій мірі, ніж вплив швидкості деформації.

5. Розроблено стартап-проект, який полягає у розробці ефективного та енергозберігаючого методу для прискорення процесів масопереносу в металах, при аналізі якого встановлено доцільність його використання.

6. Зважаючи на основні ДСТУ, ДСН, ДБН та СНиП, що регулюють необхідні для безпечної роботи параметри, було встановлено, що робоча лабораторія, в якій проводилася науково-дослідна робота, відповідає всім зазначеним нормам.

## CONCLUSIONS

1. A three-dimensional model for studying the motion of dislocations, their interaction with interstitial atoms and mass transfer processes in a crystal with a bodycentered cubic lattice was created using the molecular dynamics method.

2. The interstitial atom moves to the dislocation core and fixes by the field of its stresses in the process of dislocation motion and its approaching to the interstitial atom. The subsequent motion of the dislocation is carried out together with the interstitial atom in the core. It means that the dislocation is a moving trap for a point defect.

3. There is established that speed of dislocation movement increases in 10 times with increasing of the deformation rate at the same magnitude. Increasing of the temperature decreases speed of dislocation movement. It is connected with the increasing of Peierls barrier at high temperatures and decreasing of elasticity modulus.

4. The results of the study of self-diffusion coefficient showed that  $D$  increases in 2 times with a temperature increasing from 77 K to 900 K and in 10 times with increasing of deformation rate. It means that the deformation velocity much more influences on the mass transfer processes than a temperature.

5. A startup project for the development of an efficient and energy-saving method for accelerating the processes of mass transfer in metals has been developed.

6. The laboratory, in which the research work was carried out, meets all the specified safety standards.

**ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ**

1. Судзуки Т. Динамика дислокаций и пластичность / Т. Судзуки, Х. Есианага, С. Такеути: пер. с япон. – М.: Мир, 1989. – 296 с.
2. Новиков И. И. Дефекты кристаллического строения металлов: Учебное пособие для вузов / И. И. Новиков. – М.: Металлургия, 1983. – 232 с.
3. Хирт Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
4. Ван-Бюрен Х. Г. Дефекты в кристаллах / Х. Г. Ван-Бюрен: пер. с англ. – Москва, 1962. – 610 с.
5. Кирсанов В. В. Атомные механизмы диффузии и дефекты кристаллов / В. В. Кирсанов // Соросовский образовательный журнал. – 2001. – Т. 7, № 9. – С. 103–108.
6. Фидельман В. Р. Машинное моделирование элементарных актов самодиффузии вдоль краевых дислокаций в металлах с ГЦК- и ОЦК-решеткой / В. Р. Фидельман, В. Л. Журавлев // Физика металлов и металловедение. – 1978. – Т. 46. – С. 106–113.
7. Huang J. Is Pipe Diffusion in Metals Vacancy Controlled? A Molecular-Dynamics Study of an Edge Dislocation in Copper / J. Huang, M. Meyer, V. Pontikis // Phys. Rev. Letters. – 1989. – Vol. 63, No. 9. – P. 628–631.
8. Self-Diffusion along Dislocations in Ultra High Purity Iron / Y. Shima, Y. Ishikawa, H. Nitta, Y. Yamazaki, K. Mimura, M. Isshiki, Y. Iijima // Mater Trans. – 2002. – Vol. 43, No. 2. – P. 173–177.
9. Рыкалин Н. Н. Лазерная обработка материалов / Н. Н. Рыкалин, А. А. Углов, А. Н. Кокора. – М.: Машиностроение, 1975. – 296 с.
10. Vogel K. Application of electron and optical microscopy in studying laser irradiated metal surfaces / K. Vogel, P. Backlund // J. Appl. Phys. – 1965. – Vol. 36, No. 12. – P. 3697 – 3701.
11. Мазанко В. Ф. Диффузионные процессы в металлах под действием магнитных полей и импульсных деформаций в 2 т. Т. 2 /

В. Ф. Мазанко, А. В. Покоев, В. М. Миронов и др. – М.: Машиностроение, 2006. – 322 с.

12. Герцрикен Д. С. Импульсная обработка и массоперенос в металлах при низких температурах / Д. С. Герцрикен, В. Ф. Мазанко, В. М. Фальченко. – К.: Наукова думка, 1991. – 208 с.

13. Прокопенко Г. И. Массоперенос и подвижность дефектов в металлах при ультразвуковой ударной обработке / Г. И. Прокопенко, Д. С. Герцрикен. – Киев, 1989. – АН УССР. Ин-т. металлофизики : № 1 – 90.

14. Волосевич П. Ю. Особенности структурных изменений в армо-железе после воздействия докритических потоков импульсного излучения ОКГ / П. Ю. Волосевич, А. Е. Погорелов // Поверхность. Физика, химия, механика. – 1986. – № 9. – С. 126–130.

15. Букатов А. Г. Дислокаційна структура і механізм масопереносу в умовах імпульсного ударного навантаження в металах : Дис. магістра фізичного матеріалознавства / А. Г. Букатов – К.: НТУУ «КПІ», 2011. – 95 с.

16. Могилевский М. А. Механизмы деформации при ударно-волновом нагружении : автореф. дисс. д-ра. ф.-м. наук. / М. А. Могилевский – Л. 1986. – 35 с.

17. Влияние лазерного излучения на подвижность атомов железа / М. Е. Гуревич, Л. Н. Ларинов, В. Ф. Мазанко [и др.] // ФиХОМ. – 1977. – Т. 2. – С. 7-9.

18. Влияние многократного лазерного воздействия на массоперенос в железе / М. Е. Гуревич, Л. Н. Ларинов, В. Ф. Мазанко [и др.] // Металлофизика. – 1978. – № 73. – С. 80-83.

19. Взаимосвязь импульсных деформаций и массопереноса в металлах / В. М. Миронов, О. А. Миронова, Л. А. Митлина, [и др.] // ФиХОМ. – 2006. – № 4. – С. 77-83.

20. Барьяхтар, В. Г. Физика твердого тела: Энциклопедический словарь в 2 т. Т. 2 / В. Г. Барьяхтар. – К.: Наукова думка, 1999. – 457 с.

21. Handbook of materials modeling in 2 parts. Part A. Methods / edit. Sidney Yip. – Springer, 2005. – P. 1553.
22. Hohenberg P. Inhomogeneous electron gas / P. Hohenberg, W. Kohn // *Phys. Rev.* – 1964. – Vol. 136. – P. 864–871.
23. Kohn W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L.J. Sham // *Phys. Rev. A* – 1965. – Vol. 140. – P. 1133–1138.
24. Martin R. M. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* / R.M. Martin // Cambridge University Press. – Cambridge, 2004.
25. Car R. Unified approach for molecular dynamics and density functional theory / R. Car, M. Parrinello // *Phys. Rev. Lett.* – 1985. – Vol. 55. – P. 2471–2474.
26. Voter A. F. *Intermetallic Compounds* / A.F. Voter // Wiley, New York – 1994. – Vol. 1. – P. 77.
27. Бызов А. П. Потенциалы взаимодействия частиц с вращательными степенями свободы / А. П. Бызов, Е. А. Иванова // *Современные проблемы механики сплошной среды: Труды IX Международной конференции, посвященной 85-летию со дня рождения академика РАН И.И. Воровича.* – Ростов-на-Дону, 2005. – С. 47-51.
28. Бызов А. П. Математическое моделирование моментных взаимодействий частиц с вращательными степенями свободы / А. П. Бызов, Е. А. Иванова // *Научно-технические ведомости СПбГПУ*, 2007. – № 2. – С. 260–268.
29. Duesbery M. S. The Effect of Shear Stress on the Screw Dislocation Core Structure in Body-Centred Cubic Lattices / M. S. Duesbery, V. Vitek, D. K. Bowen // *Proc. R. Soc. Lond. A* – 1973. – Vol. 332, No. 1588. – P. 85–111.
30. Green's function boundary conditions in two-dimensional and three-dimensional atomistic simulations of dislocations / S. Rao, C. Hernandez, J. P. Simmons, T. A. Parthasarathy, C. Woodward // *Phil. Mag. A* – 1998. – Vol. 77, No. 1. – P. 231–256.



31. Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals / Yu. N. Osetsky, D. J. Bacon, A. Serra, B. N. Singh, S. I. Golubov // *J. Nucl. Mater.* – 2000. – Vol. 276, No. 1–3. – P. 65–77.
32. Daw M. S. The embedded-atom method: a review of theory and applications / M. S. Daw, S. M. Foiles, M. I. Baskes // *Mater. Sci. Rep.* – 1993. – Vol. 9, No. 7–8. – P. 251–310.
33. Osetsky Yu. N. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals / Yu. N. Osetsky, D. J. Bacon // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2003. – № 11. – P. 427–446.
34. Sinclair J. Flexible boundary conditions and nonlinear geometric effects in atomic dislocation modeling / J. E. Sinclair, P. C. Gehlen, R. G. Hoagland, J. P. Hirth // *J. Appl. Phys.* – 1978. – Vol. 49, No. 7. – P. 3890–3897.
35. Куксин А. Ю. Молекулярно-динамическое моделирование динамики краевой дислокации в алюминии / А. Ю. Куксин, В. В. Стегайлов, А. В. Янилкин // *Доклады Академии Наук.* – 2008. – Т. 420, № 4. – С. 467–471.
36. Орлов А. Н. Энергии точечных дефектов в кристаллах / А. Н. Орлов, Ю. В. Трушин. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 80 с.
37. Purja Pun G.P. A molecular dynamics study of self-diffusion in the cores of screw and edge dislocations in aluminum / G. P. Purja Pun, Y. Mishin // *Acta Mater.* – 2009. – № 57. – P. 5531–5542.
38. О механизме влияния импульсного магнитного поля на подвижность атомов в железе и алюминии / Л. Н. Лариков, В. М. Фальченко, Д. С. Герцрикен [и др.] // *ДАН СССР.* – 1978. – Т. 239, № 2. – С. 312–314.
39. Массоперенос в поверхностных слоях стали и титана при многократном воздействии импульсных разрядов / А. Е. Гитлевич, В. Ф. Мазанко, Н. А. Томашевский [и др.] // *ЭОМ.* – 1990. – № 2. – С. 20–23.
40. Погорелов А. Е. Направленный перенос атомов в железе и алюминии при импульсном лазерном воздействии : Дисс канд. физ.-мат. наук. / А. Е. Погорелов. – Киев: Институт металлофизики АН УССР, 1985. – 172 с.

41. Frenkel D. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, 2nd edn. / D. Frenkel, B. Smit // Academic, San Diego – 2002.
42. Landau D. P. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics / D. P. Landau, K. Binder // Cambridge University Press. – Cambridge, 2000.
43. Daw M. S. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Phys. Rev. B. – 1984. – Vol. 29. – P. 6443–6453.
44. Finnis M. W. A simple empirical N-body potential for transition metals / M.W. Finnis, J.E. Sinclair // Philos. Mag. A – 1984. – Vol. 50. – P. 45–55.
45. Mishin Y. Diffusion in the Ti-Al system / Y. Mishin, C. Herzig // Acta Mater. – 2000. – Vol. 48. – P. 589–623.
46. Hagen M. Point defects and chemical potentials in ordered alloys / M. Hagen, M. W. Finnis // Philos. Mag. A – 1998. – Vol. 77. – P. 447–464.
47. Voter A. F. The embedded-atom method / A.F. Voter in: J. H. Westbrook, R. L. Fleischer (eds.) // Intermetallic Compounds, John Wiley & Sons, New York. – 1994. – Vol. 1. – P. 77–90.
48. Хокни Р. Численное моделирование методом частиц / Р. Хокни, Дж. Иствуд. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
49. Humphrey W. VMD: visual molecular dynamics / W. Humphrey, K. Schulten // J. Mol. Graph. – 1996. – Vol. 14. – P. 33–38.
50. Пуарье Ж. П. Ползучесть кристаллов. Механизмы деформации металлов, керамики и минералов при высоких температурах: пер. с фр.. – М.: Мир, 1988. – 287 с.
51. Сидоренко С. І. Аномальне масоперенесення. Закономірності та механізми: Навчальний посібник для студентів технічних спеціальностей вищих навчальних закладів / С. І. Сидоренко, О. В. Філатов, С. М. Волошко. – К.: Політехніка, 2008. – 67 с.

52. Філатов О. В. Мезоскопічна фізика та моделювання матеріалів: методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт / Філатов О. В. під ред. Холявко В. В. – К.: НТУУ «КПІ», 2015. – 28 с.
53. Філатов О.В. Міграція атомів при ударній деформації ідеальних металевих кристалів.: автореф. дис. ... докт. ф.-м. наук: 01.04.13 / О. В. Філатов. –К.: Ін-т металофізики, 2005. – 32 с.
54. Гавриш О. А. Розроблення стартап-проекту. Методичні рекомендації до виконання розділу магістерських дисертацій для студентів інженерних спеціальностей / О. А. Гавриш та ін. – Київ : НТУУ «КПІ», 2016. – 28 с.
55. Основи охорони праці: Підручник. 2-ге вид. / К. Н. Ткачук, М. О. Халімовський, В. В. Зацарний та ін. – К.: Основа, 2006. – 448 с.
56. ДСанПіН 3.3.2-007-98 – Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин.
57. ДСН 3.3.6.042-99 – Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень.
58. ДБН В.2.5-28-2006 – Інженерне обладнання будинків і споруд // Природне і штучне освітлення, затверджені наказом Міністерства будівництва, архітектури та житлово-комунального господарства України від. – 2006. – Т. 15.
59. Зацарний В. В. Освітлення виробничих приміщень. Принципи створення та використання засобів захисту від шуму, вібрації та ультразвуку. Захист від випромінювань / В. В. Зацарний // Матеріали лекції 6.
60. Практикум із охорони праці. Навчальний посібник / Жидецький В. Ц., Джигирей В. С., Сторожук В. М. та ін. За ред. В. Ц. Жидецького. – Львів, Афіша, 2000. – 352 с.
61. Желібо Є. П, Безпека життєдіяльності : Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів освіти України I-IV рівнів акредитації / Є. П. Желібо, Н. М. Заверуха, В. В. Зацарний. – Київ : «Каравела» ; 2001. –

320 с.

62. ДСН 3.3.6.037 – 99 – Санітарні норми виробничого шуму, ультразвуку та інфразвуку. – К. – 1999.

63. ДСН 3.3.6.039-99 – Державні санітарні норми виробничої загальної та локальної вібрації. – К. – 1999.

64. Куликов Г. Б. Основы электробезопасности. Действие электрического тока на организм человека / Безопасность жизнедеятельности // Учебник / [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://hi-edu.ru/ebooks/xbook908/01/part-009.htm>

65. ГОСТ 12.1.009-76 – Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность.

66. ГОСТ 12.1.030-81 - Электробезопасность. Защита заземления. Зануления.

67. ДСТУ Б. В.1.1-36:2016 – Визначення категорій приміщень, будинків та зовнішніх установок за вибухопожежною та пожежною небезпекою.

## ДОДАТОК А

Вихідний код для моделювання системи з дислокаціями та міжвузельним атомом в програмі XMD

```
read Cu-Fe-Ni.txt
FILL BOUNDARY BOX 0 0 0 62.353 30 7.07
fill particle 2
    2    0.0  0.0  0.0
    2    0.5  0.5  0.5
fill align 0 0 0
fill cell
    1 0 0
    0 1 0
    0 0 1
fill orient  1 1 1  1 1 -2  -1 1 0
fill go
SELECT BOX 30.310 0 0  31.760 15 7.07
REMOVE select
calc n1=105
calc n2=105
calc dx1=6/(2*n1)
calc Ln=215*sqrt(3)/6
calc dx2=6/(2*n1)
SELECT BOX 0 0 0 30.310 15 7.07
MOVE dx1*x 0 0
SELECT BOX 31.760 0 0 62.353 15 7.07
MOVE -(Ln-x)*dx2 0 0
Select index 11088
remove select
calc sx=30.583
calc sy=13.064
calc sz=1.414
calc dz=sqrt(2)/4
calc sz1=sz-dz
calc sz2=sz+dz
Particle ADD 2
2 sx sy sz1
2 sx sy sz2
select all
mass 55.8472
SELECT BOX 0 0 0  62.353 0.409 7.07
SET ADD 1
FIX ON
SELECT BOX 0 29.393 0  62.353 29.803 7.07
SET ADD 2
FIX ON
select all
box 62.353 30 7.07
scale 2.866
dtime 3e-15
```

```

WRITE PDB model.pdb
WRITE PDB heat.pdb
SURFACE ON y
SELECT ALL
calc TEMP=1
clamp TEMP
itemp TEMP
repeat 28
    itemp TEMP
    clamp TEMP
    cmd 100
    write file +Tempr.dat TEMP
    calc TEMP = TEMP + 11
    WRITE PDB +model.pdb
WRITE PDB +heat.pdb
end
calc dk=0.01*2.866
repeat 20
    SELECT SET 2
    FIX OFF
    MOVE -dk 0 0
    FIX ON
    select all
    cmd 40
    write file +Tempr.dat TEMP
    WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move1.pdb
end
repeat 20
    SELECT SET 2
    FIX OFF
    MOVE -dk 0 0
    FIX ON
    select all
    cmd 40
    write file +Tempr.dat TEMP
    WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move2.pdb
end
repeat 20
    SELECT SET 2
    FIX OFF
    MOVE -dk 0 0
    FIX ON
    select all
    cmd 40
    write file +Tempr.dat TEMP
    WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move3.pdb
end
repeat 20
    SELECT SET 2
    FIX OFF

```

```

        MOVE -dk 0 0
        FIX ON
        select all
        cmd 40
        write file +Tempr.dat TEMP
        WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move4.pdb
    end
repeat 20
        SELECT SET 2
    FIX OFF
        MOVE -dk 0 0
        FIX ON
        select all
        cmd 40
        write file +Tempr.dat TEMP
        WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move5.pdb
    end
repeat 20
        SELECT SET 2
    FIX OFF
        MOVE -dk 0 0
        FIX ON
        select all
        cmd 40
        write file +Tempr.dat TEMP
        WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move6.pdb
    end
repeat 20
        SELECT SET 2
    FIX OFF
        MOVE -dk 0 0
        FIX ON
        select all
        cmd 40
        write file +Tempr.dat TEMP
        WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move7.pdb
    end
repeat 20
        SELECT SET 2
    FIX OFF
        MOVE -dk 0 0
        FIX ON
        select all
        cmd 40
        write file +Tempr.dat TEMP
        WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move8.pdb
    end
repeat 20

```

```
        SELECT SET 2
    FIX OFF
        MOVE -dk 0 0
        FIX ON
        select all
    cmd 40
    write file +Tempr.dat TEMP
    WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move9.pdb
    end
repeat 20
        SELECT SET 2
    FIX OFF
        MOVE -dk 0 0
        FIX ON
        select all
    cmd 40
    write file +Tempr.dat TEMP
    WRITE PDB +model.pdb
    WRITE PDB +move10.pdb
    end
```