

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОХОЖДЕНИЯ УДАРНЫХ ВОЛН ЧЕРЕЗ ГРАНИЦУ РАЗДЕЛА ДВУДОЛЬНЫХ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ Ni-Al, Cu-Au, Cu-Al, Pt-Al

¹Ерёмин А.М., ¹Захаров П.В., ²Старостенков М.Д., ¹Фенский С.В.

¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина, г. Бийск, Россия

²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, Россия

E-mail: eam77@yandex.ru

Износостойкие и инструментальные биметаллы находят все большее применение в деталях машин, подвергающихся сильному износу. Активно применяются проводниковые и контактные биметаллы. Биметаллы для глубокой вытяжки сочетают в себе наряду с высокой прочностью и достаточной пластичностью хорошую теплопроводность и коррозионную стойкость [1]. В свою очередь с переходом к нано-размерным материалам резко возрос теоретический и экспериментальный интерес к биметаллическим наночастицам. Уникальные физические и химические свойства биметаллических частиц связаны с их структурными, электронными и оптическими свойствами [2].

Структура биметаллических наночастиц определяется распределением в ней металлов. Частицы могут быть организованы в виде упорядоченного сплава, например двудольные биметаллы, иметь произвольный состав, либо иметь архитектуру типа «ядро-оболочка». Последний тип реализуется только на наноуровне и представляет собой частицы одного металла, покрытые другим. Такие материалы привлекают значительный исследовательский интерес в связи с их потенциальным применением в области гетерогенного катализа, так как они часто более активны по сравнению со своими монометаллическими аналогами. Улучшение свойств этих систем связывают со сложным взаимодействием электронов двух металлов и эффектами изменения параметров решетки в биметаллических сплавах или на межфазных границах двух металлов [3]. Особый интерес вызывают соединения Ni-Al, Cu-Au, Cu-Al, Pt-Al.

В данной работе проводится исследование прохождения ударных волн через границу раздела двудольного биметалла Ni-Al, Cu-Au, Cu-Al, Pt-Al. В качестве метода компьютерного моделирования был выбран метод молекулярной динамики. Моделирование производилось с использованием хорошо зарекомендовавшего себя пакета молекулярной динамики – LAMMPS [4]. Данный пакет разрабатывался для применения к расчетам на параллельных компьютерах. В качестве межатомного потенциала использовался потенциал, полученные методом погруженного атома (EAM) и входящие в стандартный набор LAMMPS.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002 p_a.

Литература

1. A.A. Bykov. Development of production of bimetals. Metallurgist: scientific and technical and industrial journal. 9, 61-65 (2009).
2. O.G. Ellert, M.V. Tsodikov, S.A. Nikolaev, V.M. Novotortsev. Bimetallic nanoalloys in heterogeneous catalysis industrially important reactions: synergism and structural organization of active components. Advances in Chemistry. 83(8), 718 - 732 (2014).
3. S.E. Eliana Misi, A. Ramli, F.H. Rahman. Journal of Applied Sciences. 11, 1297-1302 (2011).
4. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator <http://lammps.sandia.gov/>