

материала. В исследовании мы будем использовать программное обеспечение под названием GROMACS.

Генерация случайных состояний: создаем начальные состояния системы. Эти состояния изменяются в ходе симуляции. Местные изменения: для каждой конфигурации системы случайным образом редактируется местоположение атомов или молекул.

После изменения состояния вычисляем энергию системы для нового состояния. Для каждой конфигурации вычисляется общая энергия системы, зависящая от расстояний между атомами и их взаимодействий. Метод Монте-Карло основан на принципе моделирования вероятности перехода системы в новое состояние, что требует применения алгоритма Метрополиса для полноценной оценки вероятности перехода.

Целью алгоритма Метрополиса является создание такой последовательности состояний $a_1, a_2, \dots, a_m$, что в пределе $m \rightarrow \infty$ распределение становится больцмановским. Вероятность $P(b \leftarrow a)$ принятия пробного движения переводящего систему из состояния a в состояние b задается следующим образом:

$$P(b \leftarrow a) = \begin{cases} 1, & \text{если } p(a) < p(b) \\ p(b)/p(a), & \text{если } p(a) \geq p(b) \end{cases} \quad (1)$$

где $p(a), p(b)$ – вероятности состояний a и b соответственно.

Вероятность перехода вычисляется для каждой конфигурации на основе изменения энергии системы. Для получения верных результатов необходимо дождаться равновесия системы. В конце проводим анализ симуляции [2].

Литература

1. Основы материаловедения (металлообработка): учебник для студ. учреждений сред. проф. образования / В. Н. Заплатин [и др.]; под ред. В.Н. Заплатина. – 8-е изд., стер. – М.: Академия, 2017. – 272 с.
2. Кундас, С. П. Вычислительное материаловедение – современное состояние и перспективы развития / С. П. Кундас // Актуальные проблемы прочности. – 2024. – С. 3–10.

УДК 620.3

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТА МЕТОДОМ СЭМ ПОСЛЕ ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Магистрант Веремей И. С.¹

Д-р физ.-мат. наук, профессор Маркевич М. И.²,
кандидат физ.-мат. наук, доцент Щербакова Е. Н.³

¹Университет Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

²ФТИ НАН Беларуси, Минск, Беларусь

³Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь

Взаимодействие лазерного излучения с веществом является новым и важным направлением в современной физике твердого тела. В данной работе проводилась модификация поверхности мишени из графита с помощью воздействия лазера на алюмоиттриевом гранате LS-2134D (LOTIS, Беларусь) с длиной волны 1064 нм, генерирующем в двухимпульсном режиме (импульсы разделены временным интервалом 3 мкс, длительность импульсов 10 нс) в водной среде. Исследования структуры и элементного состава образцов проводились с помощью системы энергодисперсионного (EDS) микроанализа, установленной на сканирующем электронном микроскопе MIRA3 [1].

Из сравнения снимков следует, что поверхностный нанослой значительно модифицируется. На рис. 1 хорошо просматривается пористая структура поверхности в зоне кратера. Данный мелкокристаллический материал представляет собой пространственную сетку из кристаллитов, возможно, с аморфной межкристаллитной границей. Вероятно, разрушение поверхности происходит интенсивнее из межкристаллитной фазы.

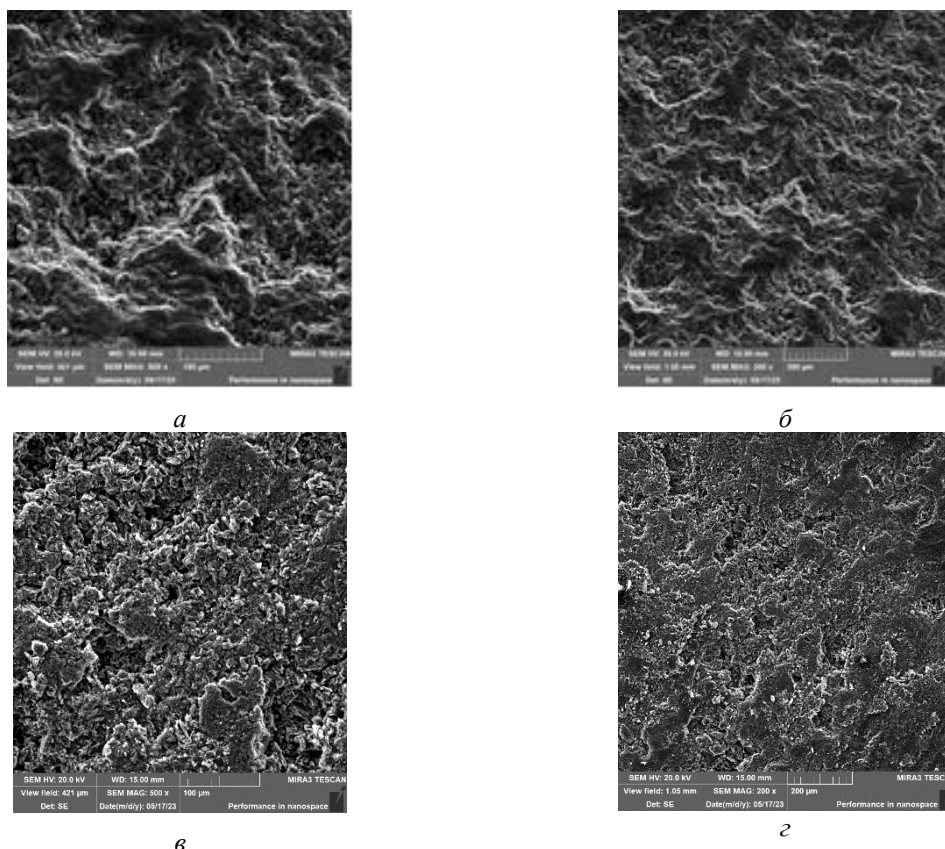


Рис. 1. СЭМ – изображение поверхности углерода марки МПГ-6 при различных увеличениях: а, б – до лазерного воздействия, в, г – после лазерного воздействия, время воздействия 60 мин., плотность мощности $1,65 \cdot 10^7$ Вт/см²

Литература

1. Obtaining carbon nanoparticles by pulse laser influence in a double-pulse mode in an aquatic environment / A. G. Anisovich [et al.] // Mongolian Journal of Physics. – 2024. – P. 75.

УДК 620.3

ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНОГО ПОКРЫТИЯ НА СМЕСОВОЙ ТКАНИ 07С11-КВ

Магистрант Веремей И. С.¹

Д-р физ. мат. наук, профессор Маркевич М. И.²,
кандидат физ.-мат. наук, доцент Щербакова Е. Н.³

¹Университет Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

²ФТИ НАН Беларуси, Минск, Беларусь

³Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь

Наноструктурированные углеродные покрытия обладают хорошей перспективой применения. На основе углеродсодержащих наполнителей разрабатываются поглощающие покрытия для использования в авиакосмической промышленности, приборостроении.

Покровие углерода осаждалось комбинированным PVD-CVD методом на смесовую ткань 07С11-КВ (65 % пэ/35 % вискоза). Смешивание волокон разного состава позволяет решать проблемы: придание высоких эксплуатационных свойств, сделать ткань более гигиеничной (воздухопроницаемой, дышащей, гигроскопичной). Это несколько повышает стоимость готового текстиля, но делает его гораздо более комфортным для ношения.

Исследования структуры и элементного состава образцов проводились с помощью системы энергодисперсионного (EDS) микроанализа, установленной на сканирующем электронном микроскопе MIRA3 [1].