

## Моделирование процессов деформирования и разрушения нанокompозитов Al/Cu

Докт. физ.-мат. наук, проф. А. В. Вахрушев<sup>1,2)</sup>, канд. физ.-мат. наук, доц. А. Ю. Федотов<sup>1,2)</sup>, магистр А. Т. Леконцев<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова (Ижевск, Российская Федерация),

<sup>2)</sup>Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук (Ижевск, Российская Федерация)

© Белорусский национальный технический университет, 2022  
Belarusian National Technical University, 2022

**Реферат.** Проведено молекулярно-динамическое моделирование одноосного растяжения охлажденной композиции Al/Cu. При расчетах использовали программный комплекс LAMMPS, включающий в себя классический код молекулярной динамики с акцентом на моделирование материалов. Для визуализации применяли программу Ovito, имеющую большое количество функций, благодаря чему пользователь может тщательно исследовать полученные результаты. При описании межатомного взаимодействия в нанокompозите Al/Cu использовали потенциал погруженного атома EAM. Выбор потенциала обусловлен тем, что он адекватно описывает и воспроизводит свойства широкого класса материалов, в том числе металлов, полупроводников и сплавов. Моделирование осуществлялось в два этапа. На первом образце, состоящий из двух кристаллитов алюминия и меди в форме параллелепипедов, соединенных вдоль одной из сводных границ, размещался в расчетной области и охлаждался при постоянном давлении. Охлаждение осуществлялось для стабилизации наносистемы. На втором этапе, соответствующем деформации, температура и давление менялись в соответствии с протекающими физическими процессами. Для управления температурой и давлением на начальной стадии охлаждения использовали алгоритм термостата и баростата Ноэ – Гувера. В статье продемонстрирован характер распределения продольных напряжений по всему объему кристалла в процессе растяжения. При достижении образцом предела упругости наблюдались зарождение дефектов кристаллической решетки и распространение их по кристаллу в виде сдвигов и поворотов атомов в кристаллических плоскостях. Определены области зарождения пластических деформаций. Максимальное разрушение материала происходило по границе раздела. С помощью молекулярно-динамического моделирования динамически исследованы параметры композиции Al/Cu (деформация, температура, механическое напряжение). Проведено сопоставление характеристик образца при деформации. В условиях нагружения в материале реализуется множество процессов, включающих в себя генерацию дефектов, упругую и пластическую деформации, генерацию повреждений и механическое перемешивание.

**Ключевые слова:** деформация, моделирование, молекулярная динамика, потенциал погруженного атома, дефекты, нанокompозиты, дислокации, механические характеристики, кристаллическая решетка, границы раздела, механическое напряжение, наноструктура

**Для цитирования:** Вахрушев, А. В. Моделирование процессов деформирования и разрушения нанокompозитов Al/Cu / А. В. Вахрушев, А. Ю. Федотов, А. Т. Леконцев // *Наука и техника*. 2022. Т. 21, № 1. С. 12–18. <https://doi.org/10.21122/2227-1031-2022-21-1-12-18>

## Modeling of Deformation and Destruction Processes of Al/Cu Nanocomposites

A. V. Vakhrushev<sup>1, 2)</sup>, A. Yu. Fedotov<sup>1, 2)</sup>, A. T. Lekontsev<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Kalashnikov Izhevsk State Technical University (Izhevsk, Russian Federation),

<sup>2)</sup>Udmurt Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences (Izhevsk, Russian Federation)

**Abstract.** The aim of this work is to carry out molecular dynamics simulation of the uniaxial stretching of a cooled Al/Cu composition. The LAMMPS software package has been used for calculations, which includes the classic molecular dynamics code with an emphasis on modeling materials. The Ovito program has been used for visualization, which has a large number of functions, so that the user can thoroughly investigate the results obtained. When describing the interatomic interaction

### Адрес для переписки

Вахрушев Александр Васильевич  
Ижевский государственный технический университет  
имени М. Т. Калашникова  
ул. Студенческая, 7,  
426069, г. Ижевск, Российская Федерация  
Тел.: +7 3412 24-45-83  
vakhrushev-a@yandex.ru

### Address for correspondence

Vakhrushev Alexander V.  
Kalashnikov Izhevsk  
State Technical University  
7, Studencheskaya str.,  
426069, Izhevsk, Russian Federation  
Tel.: +7 3412 24-45-83  
vakhrushev-a@yandex.ru

in the Al/Cu nanocomposite, we used the potential of the embedded EAM atom. The choice of potential is due to the fact that it adequately describes and reproduces the properties of a wide class of materials, including metals, semiconductors and alloys. The simulation has been carried out in two stages. At the first stage, a sample consisting of two crystallites of aluminum and copper in the form of parallelepipeds, connected along one of the joint boundaries, was placed in the computational domain and cooled at constant pressure. Cooling was carried out to stabilize the nanosystem. At the second stage, corresponding to the deformation, the temperature and pressure were changed in accordance with the ongoing physical processes. The algorithm of the thermostat and the Nose – Hoover barostat has been used to control the temperature and pressure at the initial stage of cooling. The paper demonstrates the nature of the distribution of longitudinal stresses over the entire volume of the crystal in the process of stretching. When the sample reached the elastic limit, the nucleation of crystal lattice defects and their distribution over the crystal in the form of shifts and rotations of atoms in crystal planes were observed. Areas of plastic deformation origin have been determined. The maximum destruction of the material occurred along the interface. The parameters of the Al/Cu composition (deformation, temperature, mechanical stress) have been dynamically investigated using molecular dynamics simulation. Comparison of the characteristics of the sample in the deformation process has been carried. Under loading conditions, a variety of processes are implemented in the material, including generation of defects, elastic and plastic deformation, generation of damage, and mechanical mixing.

**Keywords:** deformation, modeling, molecular dynamics, embedded atom potential, defects, nanocomposites, dislocations, mechanical characteristics, crystal lattice, interfaces, mechanical stress, nanostructure

**For citation:** Vakhrushev A. V., Fedotov A. Yu., Lekontsev A. T. (2022) Modeling of Deformation and Destruction Processes of Al/Cu Nanocomposites. *Science and Technique*. 21 (1), 12–18. <https://doi.org/10.21122/2227-1031-2022-21-1-12-18> (in Russian)

## Введение

Интерес к исследованию поведения композиционных материалов при механическом нагружении продиктован тем, что присущий им комплекс свойств и особенностей сильно отличается от традиционных конструкционных материалов. Это в первую очередь высокая прочность и низкая плотность исследуемых образцов, а также возможность управления механическими и физическими характеристиками при создании материала.

Однако поверхностное упрочнение в некоторых случаях приводит к снижению прочностных характеристик материала в целом [1, 2]. Это может быть вызвано неоднородным характером развития пластических деформаций. Также поверхности раздела материалов с различными механическими характеристиками являются концентраторами напряжений и могут стать дополнительными источниками дислокаций. Кроме того, представляет интерес вопрос распределения напряжений и деформаций в наноматериалах.

С помощью компьютерного моделирования в настоящее время разрабатываются модели для предсказания свойств и параметров нанокompозита по известным характеристикам его компонентов с целью проектирования наилучшего для определенной цели материала. Также значительный интерес представляют исследование процессов деформирования и разрушения изделий из композиционных материалов и разработка методов функциональной диагностики таких изделий [3].

В [4] методом молекулярной динамики изучен процесс одноосного растяжения с постоян-

ной скоростью вдоль границы раздела образца, состоящего из кристаллитов алюминия и никеля. В результате в полученной системе после достижения на внешних или внутренних границах раздела предела упругости зарождаются дефекты кристаллической решетки и распространяются по кристаллу.

В [5] исследуются влияние микроструктуры материала на его пластическую деформацию и его разрушение при высокоскоростном деформировании, имеющем место, например, в ударно-волновых явлениях [6]. Изучаются механизмы зарождения и роста дислокационных петель в кристалле без дефектов и при наличии плоскостей при деформациях одноосного сжатия и чистого сдвига. Оценены критические напряжения для зарождения дислокационных петель. Исследование механизмов деформации и разрушения проводили на примере алюминия с помощью молекулярно-динамического моделирования. Для описания межатомного взаимодействия в алюминии использовался потенциал погруженного атома (EAM).

В условиях сдвигового нагружения в кристаллических материалах реализуется множество процессов, включающих в себя генерацию дефектов, упругую и пластическую деформации, генерацию повреждений и механическое перемешивание. Экспериментальные исследования подобных явлений, реализуемых на атомном масштабе, сложны и требуют дорогостоящего оборудования. Еще большую сложность вызывают исследования процесса в динамике, т. е. непосредственно во время нагружения. Это приводит к необходимости разработки новых инструментов как экспериментального, так и теоретического изучения,

явно учитывающих особенности исследуемого явления на атомных масштабах [7–9]. Указанные сложности обуславливают значительный интерес развития, в том числе вычислительных методов моделирования для изучения и анализа широкого спектра процессов, протекающих вблизи границ раздела в твердых телах [10–12]. Результаты, полученные в ходе моделирования, позволяют лучше понять механизм изменения кристаллической структуры в условиях внешнего воздействия, что дает возможность целенаправленного воздействия на структуру и состав кристаллических материалов с целью повышения и совершенствования их эксплуатационных характеристик.

В статье методом молекулярной динамики проиллюстрирован процесс одноосного растяжения с постоянной скоростью вдоль границы раздела образца, состоящего из плоских охлажденных кристаллитов (бездефектных монокристаллов) алюминия и меди. Выбор охлажденных нанокompозитов для дальнейшего изучения процессов деформации обусловлен необходимостью дополнительного исследования таких актуальных материалов, как топологические изоляторы. Грани топологических изоляторов проводят электрический ток практически без сопротивления, несмотря на то что внутренняя часть композита является изолятором [13, 14]. Более ранние исследования были посвящены моделированию механических свойств включений в виде металлических наноструктур сферической формы и нанокompозитов на их основе [15–19].

### Математическая модель и постановка задачи

Для проведения моделирования использовали свободный пакет программ для классической молекулярной динамики LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), для визуализации полученных результатов – программный комплекс Ovito. В качестве потенциала межатомного взаимодействия был выбран хорошо зарекомендовавший себя метод погруженного атома EAM (Embedded Atom Method). В данном потенциале явно учитывается влияние электронной подсистемы на взаимодействие атомов друг с другом в металлах [20, 21]. Электронная плотность  $\rho_i$  в некоторой точке  $r_i$ , где находится атом  $i$ , записывается в виде отдельных электронных плотностей  $\rho_{ij}$ , создаваемых другими атомами  $j$ :

$$\rho_i = \sum_{j \neq i}^{N_c} \rho_{ij}(r_{ij}), \quad (1)$$

где  $N_c$  – количество атомов, заключенных в сфере обрезания с радиусом  $r_{cut}$ ;  $r_{ij}$  – расстояние между атомами,  $r_{ij} = \sqrt{\sum_{\alpha} (x_{i\alpha} - x_{j\alpha})^2}$ .

После усреднения подразумевается, что электронная плотность  $\rho_{ij}$  зависит только от расстояния между атомами  $r_{ij}$ . Поскольку плотность электронов уменьшается при увеличении расстояния от ядра, для аппроксимации используется следующее выражение:

$$\rho_{ij}(r_{ij}) = \rho_{ij}^0 \exp\left(-\beta \left(\frac{r_{ij}}{r_e} - 1\right)\right), \quad (2)$$

где  $r_e$  – равновесное состояние между ближайшими соседними атомами.

Энергия, с которой ионы взаимодействуют с электронной жидкостью, представляется в виде функции  $F_i(\rho_i)$ , в свою очередь зависящей в основном состоянии от электронной плотности. Ионы притягиваются друг к другу вследствие их взаимодействия с электронной жидкостью, которая находится между ними. Изначально потенциал EAM использовался при описании и моделировании металлов с гранцентрированной кубической решеткой (ГЦК) и объемноцентрированной кубической решеткой. Впоследствии данный потенциал был усовершенствован для металлов с гексагональной плотноупакованной решеткой. Недостаток EAM-потенциала заключается в том, что он не учитывает направление химических связей, возникающих при взаимодействии ядер с  $\pi$ -электронами. Тем не менее в большинстве случаев потенциал дает удовлетворительный результат при воспроизведении различных свойств широкого ряда химических элементов. Потенциальная энергия, действующая на определенный атом в EAM, записывается в следующем виде:

$$V_i = F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_c} \varphi(r_{ij}). \quad (3)$$

Отталкивание ионов, происходящее из-за парного кулоновского взаимодействия, характеризуется вторым членом в формуле (3).

Начальные скорости атомов вычисляли исходя из распределения Максвелла, которое случайным образом устанавливает скорости частиц так, чтобы кинетическая энергия системы соответствовала некоторой начальной температуре. При этом средняя скорость всех атомов в направлении каждой оси оставалась нулевой.

Моделирование выполняли в два этапа. На первом образце, состоящий из двух кристаллитов алюминия и меди в форме параллелепипедов, соединенных вдоль одной из сводных границ (рис. 1), размещался в расчетной области и охлаждался при постоянном давлении. Охлаждение осуществляли для стабилизации наносистемы. Выбор охлажденных нанокомпозитов в качестве дальнейшего объекта изучения обусловлен необходимостью дополнительного исследования таких актуальных материалов, как топологические изоляторы. На втором этапе, соответствующем деформации, температура и давление менялись согласно протекающим физическим процессам.

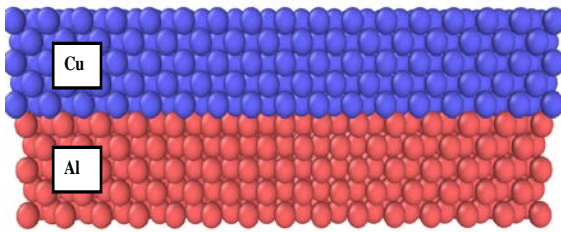


Рис. 1. Изображение образца, состоящего из кристаллитов алюминия и меди  
 Fig. 1. Image of sample, consisting of aluminum and copper crystallites

Для охлаждения на начальной стадии температура и давление поддерживались на определенном уровне при помощи алгоритмов баростатов и термостатов. Поскольку давление включает в себя кинетическую составляющую из-за скоростей частиц, оба этих алгоритма требуют расчета температуры. Обычно целевая температура и давление указываются пользователем, и термостат и баростат пытаются уравновесить системы с требуемыми температурой и давлением.

В процессе исследований использовали термостат и баростат Нозе – Гувера [6]. В термостате к системе добавляются тепловой резервуар и потери на трение. Сила трения между частицами пропорциональна произведению скорости атома на коэффициент трения  $\xi$ . Величина производной  $\xi$  по времени определяется через разность между текущей кинетической энергией и значением энергии, соответствующим исходной температуре:

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{f_i}{m_i} - \xi \frac{dr_i}{dt}, \quad i = \overline{1, N};$$

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{Q}(T - T_{ext}); \quad Q = \frac{\tau_T^2 T_{ext}}{4\pi^2},$$
(4)

где  $Q$  – коэффициент массы;  $T$  – мгновенная температура системы в текущий момент;  $T_{ext}$  –

установочная температура термостата;  $\tau_T$  – период осцилляционных колебаний.

На второй стадии после охлаждения вычисляли такие значения параметров кристалла, как степень деформации, внутренняя энергия, ее кинетическая и потенциальная составляющие. Кроме того, рассматривали распределение внутренней энергии, температуру и напряжение по кристаллу в процессе растяжения, в динамике.

### Результаты моделирования

Размеры системы по осям  $x$ ,  $y$  и  $z$  равнялись 60, 24 и 24 периодам кристаллической решетки соответственно. Граничные условия использовались периодические. Общее количество атомов после формирования наносистемы приблизительно равнялось 2200. На первом этапе расчетная область охлаждалась до температуры, близкой к 0 К. При охлаждении атомы в наносистеме стабилизировались и занимали позиции, соответствующие минимальной величине энергии. В результате уравнивания системы кристаллическая решетка вблизи границы раздела материалов заметно искажалась, происходил обмен атомами в промежуточном слое. Это связано с несоответствием констант кристаллической решетки, вследствие чего образовывались дислокации, продемонстрированные на рис. 2.

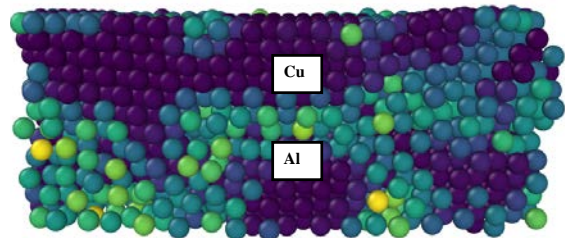


Рис. 2. Изображение образца в процессе уравнивания системы  
 Fig. 2. Image of sample in the process of system balancing

При растяжении образец сначала деформируется упруго. Затем происходит переход к пластической деформации. Под пластической понимается необратимая деформация, сопровождающаяся структурными изменениями. На рис. 3 пластическая деформация соответствует участку графика по оси абсцисс после значения 0,12. На упругом участке деформации при  $\varepsilon < \varepsilon_c$  температура близка к 0 К, а потенциальная энергия возрастает квадратично. При степени деформации  $\varepsilon > \varepsilon_c$  температура начинает повышаться, причем ее рост носит рез-

кий очаговый характер вследствие зарождения пластических сдвигов в кристаллической решетке, как показано на рис 4. Наиболее наглядным способом определения пластических сдвигов и разрушения материала является построение поля распределения температуры по кристаллу.

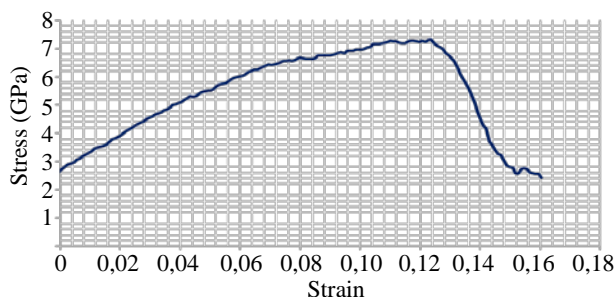


Рис. 3. Зависимость механического напряжения от степени растяжения образца

Fig. 3. Dependence of mechanical stress on the degree of stretching of the sample

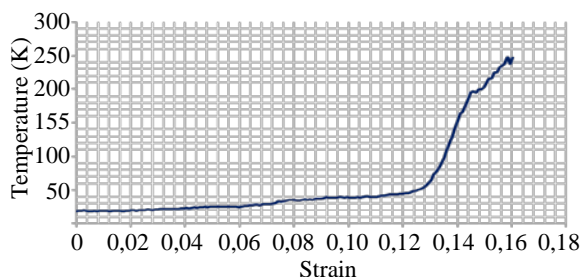


Рис. 4. Зависимость температуры нанокompозита от степени деформации при растяжении

Fig. 4. Dependence of nanocomposite temperature on the degree of deformation in the stretching process

С точки зрения теории упругости задача по растяжению данной композиции описывается уравнениями равновесия:

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = 0; \quad (5)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0, \quad (6)$$

а также законом Гука:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} = \frac{1}{E} \sigma_{xx} - \frac{\nu}{E} \sigma_{yy}; \quad (7)$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial y} = -\frac{\nu}{E} \sigma_{xx} + \frac{1}{E} \sigma_{yy}; \quad (8)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = \frac{2(1+\nu)}{E} \sigma_{yy}, \quad (9)$$

где  $E$  – модуль Юнга;  $\nu$  – коэффициент Пуассона.

В процессе деформации колебания узлов кристаллической решетки распространяются таким образом, что в объеме алюминия имеют место значительные повороты атомов, а в объеме меди отчетливо различаются распространяющиеся по кристаллу волны Людерса – Чернова. Данные волны распространяются путем сдвигов в плоскостях  $\{111\}$ , которые наиболее неустойчивы по отношению к сдвигу в ГЦК-металлах в направлении, близком к направлению максимального касательного напряжения. Пример распределения данных волн проиллюстрирован на рис. 5. Каждый шаг необратимой деформации ведет к резким локальным колебаниям энергии и, соответственно, к локальному повышению температуры [7].

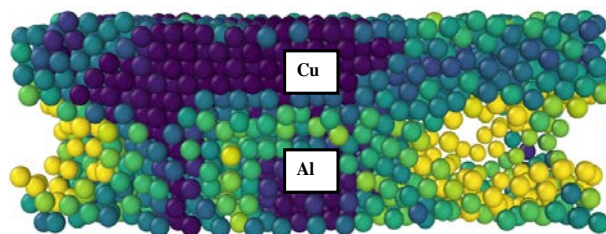


Рис. 5. Расположение дислокаций в момент разрушения слоистого нанокompозита

Fig. 5. Location of dislocations at the time of destruction of layered nanocomposite

При исследовании наиболее удобным и эффективным способом идентификации областей зарождения пластических деформаций является построение графика распределения температуры по образцу в процессе деформирования расчетной ячейки. Моделирование показало, что в областях зарождения дефектов кристаллической решетки температура может превышать среднюю температуру по изучаемому образцу. Исследования распределения температуры в нанокompозите позволили также определить плоскости скольжения при пластических сдвигах. Таким образом, каждый период необратимой деформации ведет к резкому переходу части кинетической энергии в энергию неупорядоченных процессов и, соответственно, к локальному повышению мгновенной температуры.

## ВЫВОДЫ

1. Моделирование методом молекулярной динамики позволило на наноуровне изучить поведение композиционных материалов при механическом нагружении, исследовать характер зарождения и развития в них пластической деформации. Использованный многочастичный

межатомный потенциал ЕАМ продемонстрировал хорошее воспроизведение свойств нанокompозита при исследовании процессов деформации.

2. Подготовлены алгоритм и скрипт моделирования для задачи деформации нанокompозита в программном комплексе LAMMPS. Алгоритм позволяет динамически контролировать исследуемые характеристики образца, в том числе величины деформации, термодинамические, энергетические и размерные параметры, напряжения, а также в интерактивном режиме наблюдать за процессами зарождения дислокаций и разрушения образца.

3. Проведено исследование поведения охлажденного нанокompозита Al/Cu при растяжении с постоянной скоростью деформации. В процессе достижения системой предела упругости на внешних или внутренних границах раздела наблюдались зарождение дефектов кристаллической решетки и распространение их по всему кристаллу в виде сдвигов, поворотов атомов в кристаллических плоскостях. При деформировании композиции Al/Cu определены области зарождения пластических деформаций. Максимальное разрушение материала происходит по границе раздела. Характер развития пластической деформации определялся наличием в кристалле плоскостей, сдвиг вдоль которых происходил в направлении максимального касательного напряжения.

4. Результаты проведенных исследований можно использовать для изучения процессов деформации нанокompозиционных материалов с перспективными функциональными свойствами. Кроме того, охлажденные наноструктурированные объекты активно применяются в качестве топологических изоляторов, которые обладают дифференцированными характеристиками проводимости внутри материала и на его поверхности.

Работы выполнены при финансовой поддержке Ижевского государственного технического университета имени М. Т. Калашникова (проект 28.04.01 / 18ВАВ), гранта УрО РАН № 18-10-1-29 и бюджетного финансирования по проекту 0427-2019-0029.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Влияние геометрии и структуры границы раздела на характер развития пластической деформации на мезомасштабном уровне борированных образцов конструкционных сталей / С. В. Панин [и др.] // Физическая мезомеханика. 2000. Т. 3, № 2. С. 99–115.
2. Физическая мезомеханика и молекулярно-динамическое моделирование / И. Ф. Головнев [и др.] // Физическая мезомеханика. 1998. № 2. С. 21–33.
3. Скворцов, Ю. В. Механика композиционных материалов / Ю. В. Скворцов. Самара: СГАУ, 2013. 94 с.
4. Hoover, W. Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions / W. Hoover // Physical Review A. 1985. Vol. 31, Iss. 3. P. 1695–1697.
5. Болеста, А. В. Молекулярно-динамическое моделирование квазистатического растяжения композиции Al/Ni вдоль границы раздела / А. В. Болеста, И. Ф. Головнев, В. М. Фомин // Физическая мезомеханика. 2002. № 4. С. 15–21.
6. Влияние микроструктуры материала на динамическую пластичность и прочность: молекулярно-динамическое моделирование / П. А. Жилев [и др.] // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т. 9, № 1. С. 104–109.
7. Канель, Г. И. Ударные волны в физике конденсированного состояния / Г. И. Канель, В. Е. Фортон, С. В. Разоренов // УФН. 2007. Т. 177, № 8. С. 809–830.
8. Горячева, И. Г. Механика фрикционного взаимодействия / И. Г. Горячева. М.: Наука, 2001. 478 с.
9. Панин, В. Е. Механизм влияния величины зерна на сопротивление деформированию поликристаллов в концепции структурных уровней деформации твердых тел. Часть I. Необходимость учета мезоскопических структурных уровней деформации при анализе уравнения Холла – Петча / В. Е. Панин, Т. Ф. Елсукова, Ю. В. Гриняев // Физическая мезомеханика. 2003. Т. 6, № 3. С. 63–74.
10. Persson, B. N. J. Elastic Contact between Randomly Rough Surfaces: Comparison of Theory with Numerical Results / B. N. J. Persson, F. Bucher, B. Chiaia // Physical Review B. 2002. Vol. 65, Iss. 18. P. 184106.1–7.
11. Jordanoff, I. First Steps for a Rheological Model for the Solid Third Body / I. Jordanoff, Y. Berthier // Tribology Series. 1999. Vol. 36. P. 551–559.
12. Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твердых тел / А. М. Кривцов [и др.] // Математика, механика и информатика 2002: тр. Всерос. конф., посвящ. 10-летию РФФИ. М.: Физматлит, 2002. С. 361–377.
13. Веденев, С. И. Квантовые осцилляции в трехмерных топологических изоляторах / С. И. Веденев // Успехи физических наук. 2017. № 187. С. 411–429.
14. Бег, Ф. Идентификация двумерных антиферромагнитных топологических изоляторов класса  $Z_2$  / Ф. Бег, П. Пужоль, Р. Рамазашвили // ЖЭТФ. 2018. Т. 153, вып. 1. С. 108–126.
15. Vakhrushev, A. V. Calculation of the Elastic Parameters of Composite Materials Based on Nanoparticles Using Multilevel Models / A. V. Vakhrushev, A. Y. Fedotov, A. A. Shushkov // Nanostructures, Nanomaterials, and Nanotechnologies to Nanoindustry. New Jersey: Apple Academic Press. 2014. Chapter 4. P. 51–70.
16. Vakhrushev, A. V. Modeling of Processes of Composite Nanoparticle Formation by the Molecular Dynamics Technique. Part 1. Structure of Composite Nanoparticles / A. V. Vakhrushev, A. Y. Fedotov, A. A. Vakhrushev // Nanomechanics Science and Technology. 2011. Vol. 2, Iss. 1. P. 9–38.
17. Vakhrushev, A. V. Modeling of Processes of Composite Nanoparticle Formation by the Molecular Dynamics Technique. Part 2. Probabilistic Laws of Nanoparticle Characteristics / A. V. Vakhrushev, A. Y. Fedotov,

- A. A. Vakhrushev // Nanomechanics Science and Technology. 2011. Vol. 2, Iss. 1. P. 39–54.
18. Исследование механизмов формирования наночастиц металлов, определение механических и структурных характеристик нанообъектов и композиционных материалов на их основе / А. В. Вахрушев [и др.] // Химическая физика и мезоскопия. 2010. Т. 12, № 4. С. 486–495.
  19. Вахрушев, А. В. Исследование вероятностных законов распределения структурных характеристик наночастиц, моделируемых методом молекулярной динамики / А. В. Вахрушев, А. Ю. Федотов // Вычислительная механика сплошных сред. 2009. Т. 2, № 2. С. 14–21.
  20. Daw, M. S. Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals / M. S. Daw, M. I. Baskes // Physical Review B. 1984. Vol. 29, Iss. 12. P. 6443–6453.
  21. Foiles, S. M. Embedded-Atom Method Function for the Fcc Metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their Alloys / S. M. Foiles, M. I. Baskes, M. S. Daw // Physical Review B. 1986. Vol. 33, Iss. 12. P. 7983–7991.
- Поступила 24.12.2019  
Подписана в печать 14.01.2021  
Опубликована онлайн 28.01.2022
- REFERENCES
1. Panin S. V., Koval' A. V., Trusova G. V., Pochivalov Yu. I., Sizova O. V. (2000) Influence of Geometry and Structure of Interface on Nature of Plastic Deformation Development at Mesoscale Level of Borated Structural Steel Samples. *Fizicheskaya Mezomekhanika = Physical Mesomechanics*, 3 (2), 99–115 (in Russian).
  2. Golovnev I. F., Golovneva E. I., Konev A. A., Fomin V. M. (1998) Physical Mesomechanics and Molecular Dynamics Modeling. *Fizicheskaya Mezomekhanika = Physical Mesomechanics*, (2), 21–33 (in Russian).
  3. Skvortsov Yu. V. (2013) *Mechanics of Composite Materials*. Samara, Samara State Aerospace University. 94 (in Russian).
  4. Hoover W. (1985) Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions. *Physical Review A*, 31 (3), 1695–1697. <https://doi.org/10.1103/physreva.31.1695>.
  5. Bolesta A. V., Golovnev I. F., Fomin V. M. (2002) Molecular Dynamics Simulation of Quasi-Static Stretching of Al/Ni Composition Along Interface. *Fizicheskaya Mezomekhanika = Physical Mesomechanics*, (4), 15–21 (in Russian).
  6. Zhilyaev P. A., Kuksin A. Yu., Norman G. E., Starikov S. V., Stegailov V. V., Yanilkin A. V. (2010) Influence of Material Microstructure on Dynamic Plasticity and Strength: Molecular-Dynamic Simulations. *Fiziko-Khimicheskaya Kinetika v Gazovoy Dinamike = Physico-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 9 (1), 104–109 (in Russian).
  7. Kanel G. I., Fortov V. E., Razoryonov S. V. (2007) Shock Waves in Condensed Matter Physics. *Physics-Uspekhi*, 50 (8), 771–791.
  8. Goryacheva I. G. (2001) *Mechanics of Friction Interaction*. Moscow, Nauka Publ. 478 (in Russian).
  9. Panin V. E., Elsukova T. F., Grinyaev Yu. V. (2003) Mechanism of Grain Size Influence on Strain Resistance of Polycrystals in Context of Structural Deformation Levels of Solids. Part I. Consideration of Mesoscopic Structural Deformation Levels in Analyzing the Hall – Petch Equation. *Fizicheskaya Mezomekhanika = Physical Mesomechanics*, 6 (3), 63–74 (in Russian).
  10. Persson B. N. J., Bucher F., Chiaia B. (2002) Elastic Contact between Randomly Rough Surfaces: Comparison of Theory with Numerical Results. *Physical Review B*, 65 (18), 184106.1–7. <https://doi.org/10.1103/physrevb.65.184106>.
  11. Jordanoff I., Berthier Y. (1999) First Steps for a Rheological Model for the Solid Third Body. *Tribology Series*, 36, 551–559. [https://doi.org/10.1016/s0167-8922\(99\)80075-3](https://doi.org/10.1016/s0167-8922(99)80075-3).
  12. Krivtsov A. M., Volkovets I. B., Tkachev P. V., Tsaplin V. A. (2002) Application of Particle Dynamics Method for Description of High-Speed Destruction of Solids. *Matematika, Mekhanika i Informatika 2002: tr. Vseros. Konf., Posvyashchennoi 10-Letiyu RFFI* [Mathematics, Mechanics and Informatics 2002: Proceedings of All-Russian Conference, Dedicated to the 10<sup>th</sup> Anniversary of the RFB]. Moscow, Fizmatlit Publ., 361–377 (in Russian).
  13. Vedenev S. I. (2017) Quantum Oscillations in Three-Dimensional Topological Insulators. *Physics-Uspekhi*, 60 (4), 385–401. <https://doi.org/10.3367/ufne.2017.01.038053>.
  14. Bègue F., Pujol P., Ramazashvili R. (2018) Identification Two-Dimensional  $Z_2$  Antiferromagnetic Topological Insulators. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 153 (1), 108–126. <https://doi.org/10.1134/s1063776118010028>.
  15. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y., Shushkov A. A. (2014) Calculation of the Elastic Parameters of Composite Materials Based on Nanoparticles Using Multilevel Models. *Nanostructures, Nanomaterials, and Nanotechnologies to Nanoindustry*. New Jersey, Apple Academic Press, Chapter 4, 51–70. <https://doi.org/10.1201/b16956-15>.
  16. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y., Vakhrushev A. A. (2011) Modeling of Processes of Composite Nanoparticle Formation by the Molecular Dynamics Technique. Part 1. Structure of Composite Nanoparticles. *Nanomechanics Science and Technology*, 2 (1), 9–38. <https://doi.org/10.1615/nanomechanicsscitechintj.v2.i1.20>.
  17. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y., Vakhrushev A. A. (2011) Modeling of Processes of Composite Nanoparticle Formation by the Molecular Dynamics Technique. Part 2. Probabilistic Laws of Nanoparticle Characteristics. *Nanomechanics Science and Technology*, 2 (1), 39–54. <https://doi.org/10.1615/nanomechanicsscitechintj.v2.i1.30>.
  18. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y., Vakhrushev A. A., Shushkov A. A., Shushkov A. V. (2010) Study of Process Formation of Metal Nanoparticles, Determination of Mechanical and Structural Parameters of Nanoobjects and Composites Based on them. *Khimicheskaya Fizika i Mезоскопиya = Chemical Physics and Mesoscopy*, 12 (4), 486–495 (in Russian).
  19. Vakhrushev A. V., Fedotov A. Y. (2009) Investigation of Probability Distribution Laws of Structural Properties of Nanoparticles Simulated by Molecular Dynamics Method. *Vychislitel'naya Mekhanika Sploshnykh Sred = Computational Continuum Mechanics*, 2 (2), 14–21 (in Russian).
  20. Daw M. S., Baskes M. I. (1984) Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals. *Physical Review B*, 29 (12), 6443–6453. <https://doi.org/10.1103/physrevb.29.6443>.
  21. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. (1986) Embedded-Atom Method Function for the Fcc Metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their Alloys. *Physical Review B*, 33 (12), 7983–7991. <https://doi.org/10.1103/physrevb.33.7983>.

Received: 24.12.2019

Accepted: 14.01.2021

Published online: 28.01.2022