

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

На правах рукопису

**Атомістичне моделювання руху тріщини в карбіді кремнію з
вуглецевими включеннями**

Галузь знань: 10 Природничі науки
Спеціальність: 104 Фізика та астрономія
Освітня програма: Фізика наносистем

Кваліфікаційна робота магістра
студента 2 року навчання
Вадима ШВЕРНИКА

Науковий керівник:
кандидат фізико-математичних наук,
доцент, завідувач кафедри фізики металів
Василь КУРИЛЮК

Робота заслухана на засіданні кафедри фізики металів та рекомендована до захисту на ЕК, протокол №12 від «22» травня 2025 р.

Завідувач кафедри фізики металів



Василь КУРИЛЮК

Київ – 2025

АНОТАЦІЯ

Вадим ШВЕРНИК. Атомістичне моделювання руху тріщини в карбіді кремнію з вуглецевими включеннями.

Кваліфікаційна робота магістра за спеціальністю 104 Фізика та астрономія, освітня програма «Фізика наносистем». – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, кафедра фізики металів. – Київ – 2025.

Науковий керівник: кандидат фізико-математичних наук, доцент Василь КУРИЛЮК, завідувач кафедри фізики металів.

Методом молекулярної динаміки було змодельовано рух тріщини в монокристалічному, шаруватому SiC, та в шаруватому SiC з включеннями графіту з трьома різними швидкостями деформації. Отримано залежності напруження-деформації та пробіг тріщини-деформації. Проаналізовано вплив швидкості деформації розтягу на рух тріщини у зразку.

Ключові слова: карбід кремнію, графіт, тріщина, молекулярна динаміка, деформація, напруження.

SUMMARY

Vadym SHVERNYK. Atomistic Modeling of Crack Propagation in Silicon Carbide with Carbon Inclusions.

Master's qualification work in specialty 104 Physics and Astronomy, educational program "Physics of Nanosystems". – Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics, Department of Metal Physics. – Kyiv – 2025.

Research supervisor: Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Associate Professor Vasyl KURYLIUK, Head of Metal Physics Department.

The motion of a crack in monocrystalline, layered SiC, and in layered SiC with graphite inclusions was modeled using the molecular dynamics method at three different strain rates. Stress–strain and crack propagation–strain dependencies were

obtained. The influence of strain rate on crack propagation in the sample was analyzed.

Keywords: silicon carbide, graphite, crack, molecular dynamics, deformation, stress.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	4
1.1 Застосування та властивості карбіду кремнію.....	5
1.2 Використання шаруватих структур.....	8
1.3 Використання методу молекулярної динаміки для дослідження фізичних властивостей матеріалів.....	14
II. МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ	17
2.1 Опис методу та об'єкту досліджень	17
2.2 Опис скрипту LAMMPS для моделювання руху тріщини.....	20
III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ	26
3.1. Результати моделювання одновісного розтягу шаруватих композитів на основі SiC.....	26
3.2. Механізми руйнування структур на основі карбіду кремнію з графітовими шарами	29
3.3. Визначення пробігів тріщини у структурах на основі карбіду кремнію..	32
ВИСНОВКИ	35
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	36

ВСТУП

У сучасних технологіях надвисоких температур, агресивних середовищ та екстремальних навантажень все більшої актуальності набувають матеріали з високою міцністю, термостійкістю і стійкістю до зносу. Серед таких матеріалів особливе місце займає карбід кремнію (SiC) – кераміка з унікальним поєднанням механічних, теплових та хімічних властивостей. Завдяки високій твердості, низькому коефіцієнту термічного розширення та добрій термостійкості, SiC широко використовується в авіаційній, космічній, ядерній енергетиці та мікроелектроніці.

Незважаючи на свої переваги, карбід кремнію, як і інші керамічні матеріали, є крихким і схильним до утворення та поширення тріщин, що значно обмежує його практичне застосування. Для покращення механічних властивостей, зокрема тріщиностійкості, все частіше застосовують модифікацію структури SiC введенням вуглецевих наноструктурованих включень. Такі включення можуть змінювати механізми розповсюдження тріщин, локалізувати напруження та сприяти зупинці тріщини.

Аналіз поведінки тріщин на атомістичному рівні є вкрай важливим для глибшого розуміння процесів руйнування і проектування більш надійних матеріалів. Одним із найперспективніших методів для таких досліджень є атомістичне моделювання, зокрема метод молекулярної динаміки. Цей підхід дозволяє відслідковувати динаміку атомів у часі, моделювати виникнення і поширення тріщин, а також досліджувати вплив різних включень і дефектів на механічну поведінку матеріалу.

У межах цієї роботи здійснюється моделювання руху тріщини в карбіді кремнію з включеннями вуглецю. Метою дослідження є з'ясування, яким чином ці включення впливають на механізми зародження та поширення тріщин, а також на напружено-деформований стан навколо них. Отримані результати можуть бути використані для оптимізації структури SiC-композитів з метою підвищення їхньої тріщиностійкості та довговічності.

I. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1 Застосування та властивості карбіду кремнію

Карбід кремнію (SiC) є одним із ключових матеріалів у сучасній фізиці завдяки його унікальним фізичним властивостям, таким як висока міцність, твердість, термостійкість. Ці характеристики роблять матеріали з основою SiC перспективними для використання в умовах екстремальних навантажень, зокрема у балістичному захисті, аерокосмічній галузі.[1]

Широко SiC використовують в мікроелектроніці, наприклад при виготовленні діода Шотткі. Карбід кремнію чудово підходить через критичну напругу електричного поля, яка значно вища за кремній (Si) і арсенід галію (GaAs), також SiC має високу теплопровідність, що допомагає ефективно відводити тепло від діода під час роботи, знижуючи ризик перегріву та підвищуючи надійність пристрою.[2]



Рис 1.1 Діоди шотткі виготовлені з SiC

Окрім гарних електричних властивостей SiC має чудові механічні властивості, отже використовується в сучасних системах балістичного захисту, які потребують високого модуля пружності, міцності на вигин, твердості та в'язкості руйнування, проте крихкість SiC залишається основним недоліком матеріалу та обмежує його використання, особливо в умовах багаторазових ударів, які спричиняють утворення та поширення тріщин, які суттєво знижують механічні властивості матеріалу.[3] Кераміки широко використовують в балістичному захисті також через низьку щільність $2,42\text{--}3,95\text{ г/см}^3$, що суттєво впливає на вагу броні та на мобільність людини, що її використовує.[4]



Рис 1.2 Бронеплита виготовлена з композиту на основі SiC

SiC має гарні механічні властивості, що визначає поведінку під час удару, а саме в'язкість руйнування $6,8\text{ МПа}$, модуль Юнга 440 ГПа , міцність на вигин 490 МПа , твердість 32 ГПа .[5]

При дії високошвидкісного навантаження відбувається формування тріщин типу Герца у точці контакту з бронею, а також тріщин на протилежному боці пластини.[6] Ці тріщини швидко поширюються через крихкість матеріалу, що може призводити до руйнування всієї структури. У випадку монолітної кераміки пошкодження часто поширюється по всій

пластині, що значно знижує її здатність витримувати багаторазові удари. Для подолання цього обмеження використовуються багатошарові системи або мозаїчні структури.

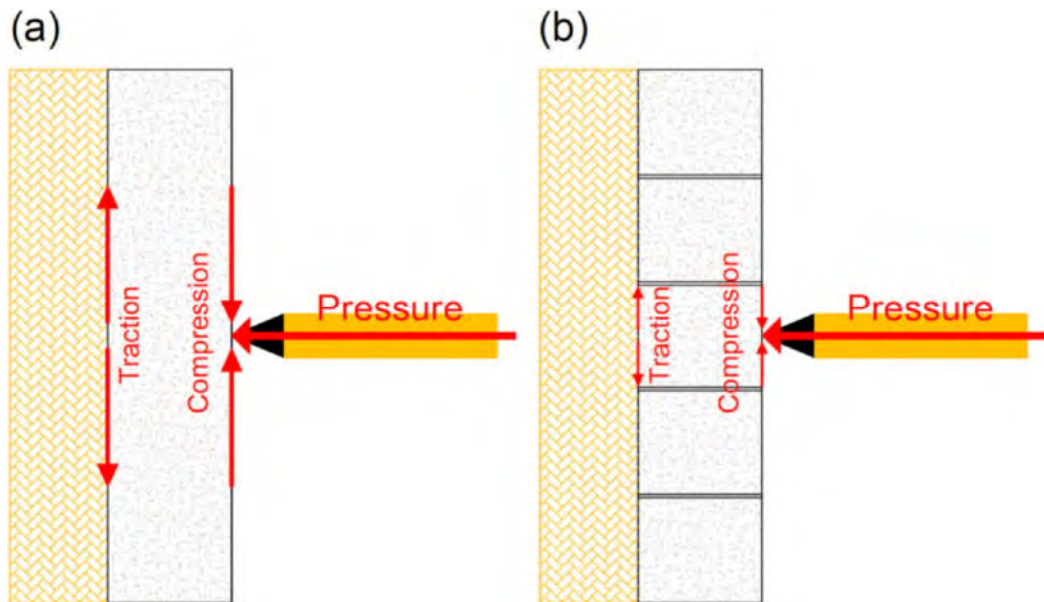


Рис 1.3 Схема розподілу сил внаслідок балістичного удару (а) монолітна керамічна плита (б) мозаїчна керамічна броня. Адаптовано з роботи[7].

Останні дозволяють локалізувати пошкодження в межах окремих плиток і мінімізувати розповсюдження тріщини. Одним із можливих способів покращення механічних властивостей матеріалу на основі SiC є введення вуглецевих включень, які можуть впливати на механізми зародження та поширення тріщин у матеріалі.[7] Для розуміння цих процесів важливим є застосування методів молекулярної динаміки, які дозволяють досліджувати взаємодію між атомами, моделювати поширення тріщини, та виявляти вплив на макроскопічні характеристики матеріалу.

1.2 Використання шаруватих структур

Введення вуглецевих включень до структури SiC може змінювати механізми зародження і поширення тріщин. Зокрема вуглецеві включення можуть сповільнювати поширення тріщин, локалізуючи пошкодження. Включення будуть впливати на розподіл напружень у матеріалі, зменшуючи ймовірність повного руйнування матеріалу при значних навантаженнях.

В балістичних системах захисту використовується багатошарові структури, які мають свої дефекти, які разом з утвореними тріщинами та високим навантаженням спричиняють руйнування матеріалу.[7]

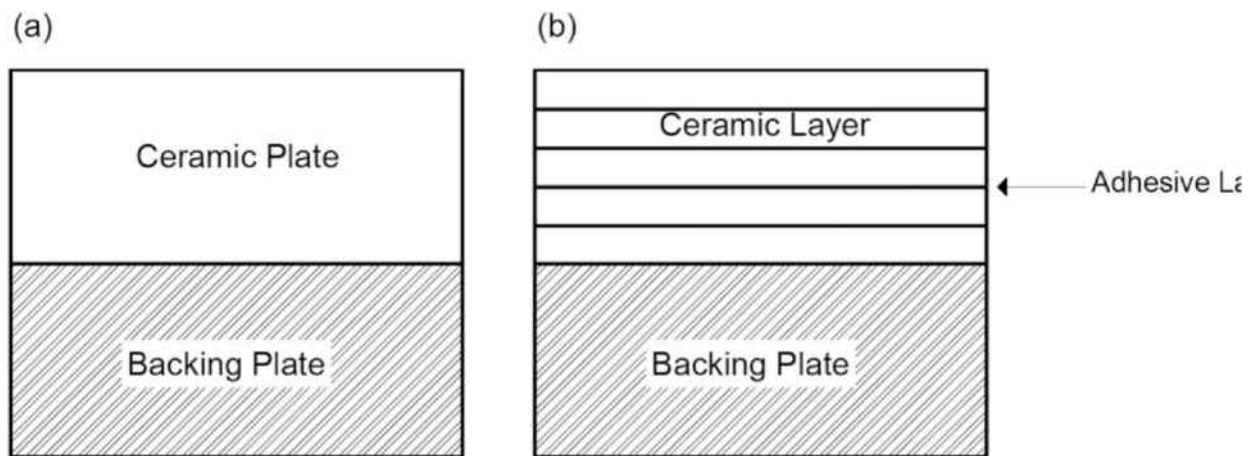


Рис 1.4 Схематична різниця між двома системами монолітної пластинчастої броні (а) монолітна керамічна броня (б) багатошарова керамічна броня. Адаптовано з роботи[7].

Такими дефектами можуть бути мікротріщини, межі зерен та порожнини, що виникають в матеріалі.

Границі зерен мають невпорядковану атомну структуру порівняно з ідеальним кристалом, що робить їх місцями підвищеної енергії. Це сприяє накопиченню дислокацій та порожнин під навантаженням та локалізації деформації, особливо в умовах високої напруги. Порожнечі та тріщини призводять до повного руйнування матеріалу. Виникнення та збільшення

тріщин виникає внаслідок руйнування міжатомних зв'язків. Інформацію про зародження та поширення тріщин на межі розділу можна використовувати для дослідження деформації.

Матеріал виготовлений з багатьох шарів кераміки та з різними включеннями може збільшити механічні властивості, тому останнім часом саме такі матеріали використовуються в балістичних системах.

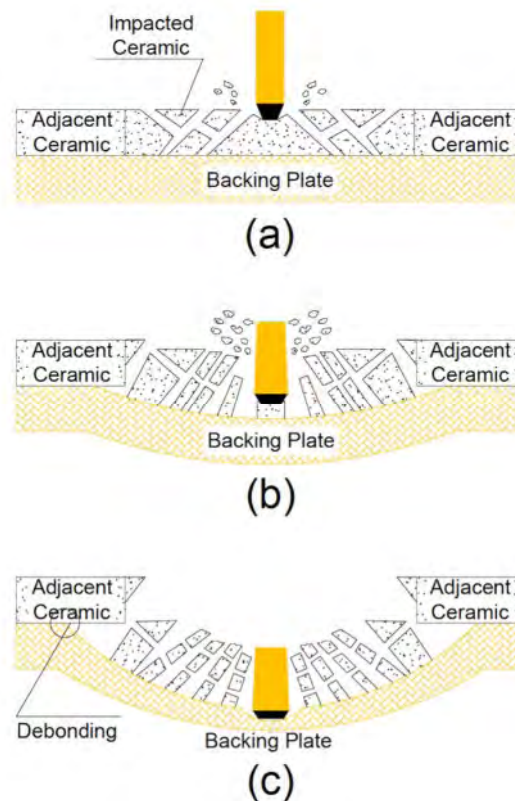


Рис 1.5 Три етапи балістичного впливу на мозаїчну кераміку (а) перший етап (б) другий етап (в) третій етап. Адаптовано з роботи[7].

Як відомо, тиск є результатом співвідношення між силою та площею, до якої ця сила прикладена.[8] Переносячи цю концепцію на балістичну подію, аналізуючи 3 фази, показані на рис. 1.5, можна помітити, що в міру просування фаз наконечник снаряда сплющується, збільшуючи площу контакту між керамікою та снарядом. Тому в початковий момент удару виникає колосальний тиск, при якому вся сила пострілу зосереджена на дуже малій

площі. В результаті твердості та модуля пружності протягом інших етапів фаза витримки дозволяє відбутися ерозії наконечника снаряда, сплющуючи його та, отже, збільшуючи площу контакту снаряда, який застосовує силу удару, що призводить до зниження тиску. Крім того, існує непрямий зв'язок між модулем пружності, який пов'язаний з імпедансом поширення ударних хвиль, із балістичними характеристиками. Тобто, чим вищий опір кераміки, тим менша енергія, що розсіюється в керамічному корпусі.

Пластичність керамік залишається великим недоліком цього класу матеріалів, що пов'язано з обмеженим рухом дислокацій в матеріалі. На високу крихкість також впливають границі зерен.[9] На вістрі тріщини в кераміках спостерігається крихке руйнування, проте після введення подвійних меж спостерігається пластична деформація.

Використання подвійних меж покращує механічні властивості матеріалу, а саме пластичність зразку.[10] МД моделювання дозволяє розглянути поведінку зразку з подвійними межами, які є особливим класом меж зерен з найнижчою енергією розділу та високим ступенем симетрії. Подвійні межі містять розташування атомів що є дзеркальним відображенням цих атомів з іншої сторони розділених подвійною площиною.

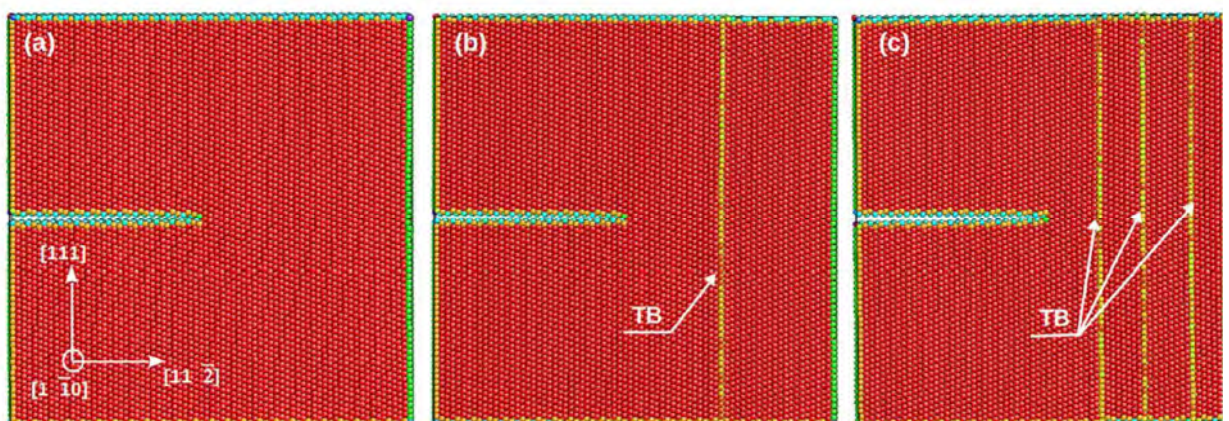


Рис. 1.6 Початкові моделі для моделювання, розглянуті в цьому дослідженні. Атомарно гостра тріщина (111)110110 у ідеальному ОЦК Fe

(a), зразок з однією двійниковою межею (ТВ) (b), зразок з кількома двійниковими межами (с). Адаптовано з роботи[10].

Зменшення напруження є незначним у випадку ідеальної моделі, а також моделі з однією подвійною межею, тоді як значне зменшення спостерігається в моделі з трьома подвійними межами. Після зменшення, напруження змінюється від зразка до зразка, в основному через їхню різну внутрішню мікроструктуру, тобто, подвійні межі. В ідеальному зразку напруження є постійним до певної величини деформації, а потім швидко падає до нуля, вказуючи на руйнування.

Таким чином включення в кераміку або шаруватість структури можуть сповільнити утворення тріщини в зразку, та підвищити пластичність матеріалу.

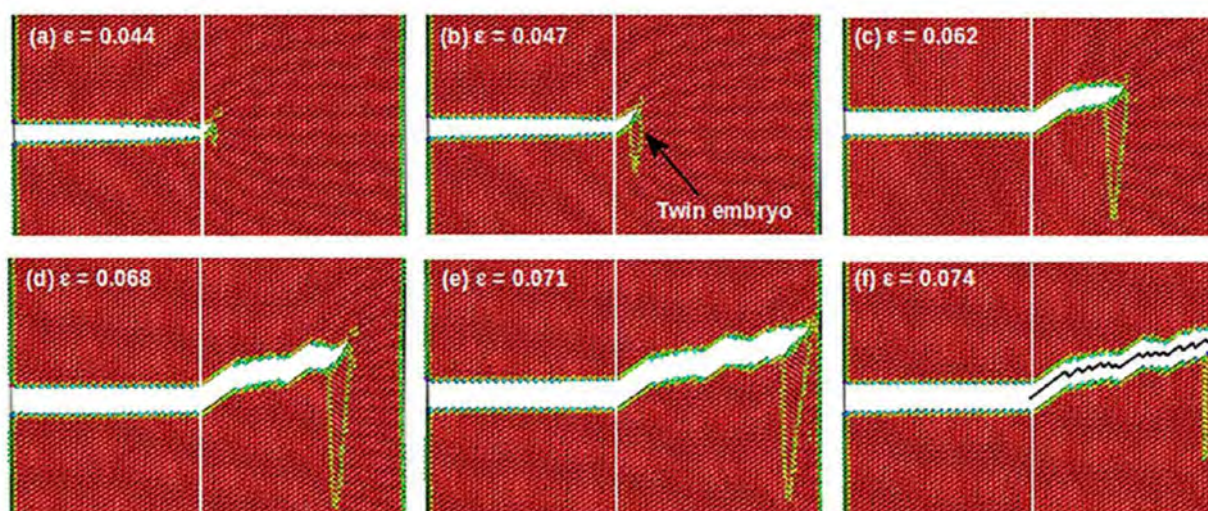


Рис. 1.7 Атомні знімки, що демонструють ріст тріщини в ідеальному ОЦК Fe залежно від деформації. Адаптовано з роботи[10].

Коли деформація досягає критичного значення, тріщина проникає крізь двійникову межу і швидко поширюється по площині, що веде до остаточного руйнування. Отже, наявність двійникових меж викликає пластичну деформацію, яка притуплює тріщину та затримує крихке руйнування. У початковій конфігурації зразку тріщина починається із зародження порожнеч,

їх зростання та злиття, що часто спостерігається при прастичній деформації. Навпаки, при крихкому руйнуванні, порожнечі ростуть попереду або разом із уже існуючою тріщиною, що спричиняє повне руйнування матеріалу. Пустоту можна відрізнити від тріщини, у її формуванні, розмірі, формі та способі руйнування, викликаного нею.

Згідно з МД – симуляціями саме границі зерен є місцями зародження дислокацій, також внаслідок концентрації напружень можуть виникати мікротріщини.

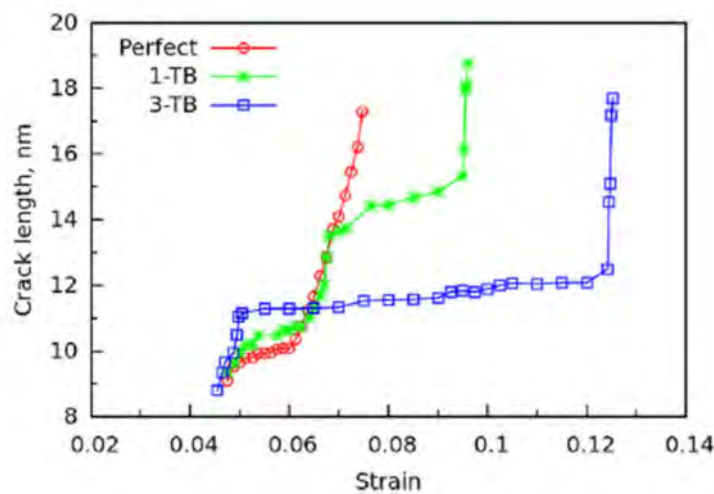


Рис. 1.8 Довжина тріщини як функція деформації під час росту тріщини у попередньо надрізаному ідеальному ОЦК Fe, а також у зразках з однією та кількома двійниковими межами. Адаптовано з роботи[10].

Для кращого розуміння поведінки росту тріщини її довжину у роботі [10] вимірювали як функцію деформації. На рис. 1.8 показано довжину тріщини в залежності від деформації в попередньо надрізаному ідеальному ОЦК-залізі, в ОЦК-залізі з двійниковими межами. Довжина тріщини визначається як мінімальна відстань між початковим і кінцевим положенням її кінця. На відміну від ідеального зразка або зразка з однією ТВ, у зразку з трьома ТВ тріщина спочатку швидко росте, а потім її довжина залишається майже незмінною аж до руйнування. Це свідчить, що збільшення кількості ТВ

підвищує опір росту тріщини або зменшує її швидкість. В якості двійникових меж можна використовувати різну конфігурацію атомів у структурі, тобто шаруваті структури одного чи різних матеріалів.

Молекулярно-динамічне моделювання може проводитись за високих швидкостей деформації, що призводить до завищення механічних властивостей матеріалу. Швидкість деформації суттєво впливає на критичну напругу і характер росту тріщини в матеріалі в той час вищі швидкості деформації знижують тріщиностійкість та посилюють крихкий характер руйнування.

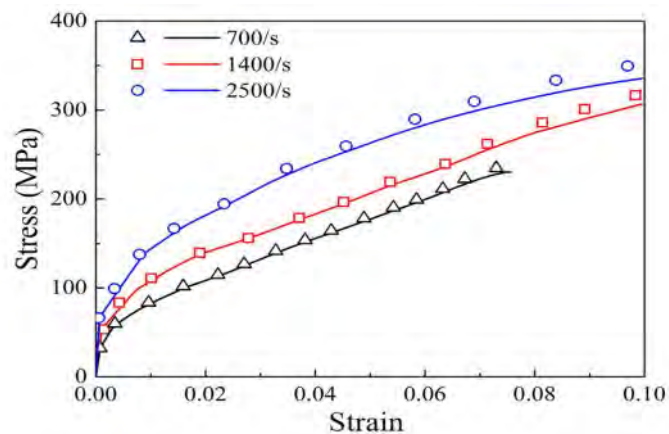


Рис. 1.9 Порівняння між результатами моделювання з урахуванням міцного інтерфейсу та експериментальними даними. Символи позначають експериментальні дані, а криві - результати моделювання. Адаптовано з роботи[11].

Рис 1.9 демонструє порівняння між експериментальними та чисельними результатами для нанокompозиту SiC/Mg при різних швидкостях деформації. Зі збільшенням швидкості деформацій (від 700 c^{-1} до 2500 c^{-1}) спостерігається зростання граничної напруги.[11] Пластична деформація до руйнування також зростає, що свідчить про зміну механізму пошкодження. Чисельна модель з урахуванням міцного інтерфейсу добре узгоджується з експериментом, особливо при високій швидкості деформації.

Висока швидкість деформації не дозволяє атомам або дислокаціям достатньо швидко перебудовуватись, що призводить до локалізації напружень на інтерфейсі. при високій швидкості деформації механізм розшарування зміщується в бік інтерфейсної декогезії, особливо якщо міжатомний зв'язок слабкий.

Швидкість деформації значно впливає на механізм руйнування шаруватих композитів SiC/Mg.[12] Високі швидкості деформації призводять до швидкого накопичення напружень і активують міжфазне руйнування. Це вимагає особливої уваги до проєктування інтерфейсного шару для матеріалів, що працюють в умовах ударних або динамічних навантажень.

1.3 Використання методу молекулярної динаміки для дослідження фізичних властивостей матеріалів

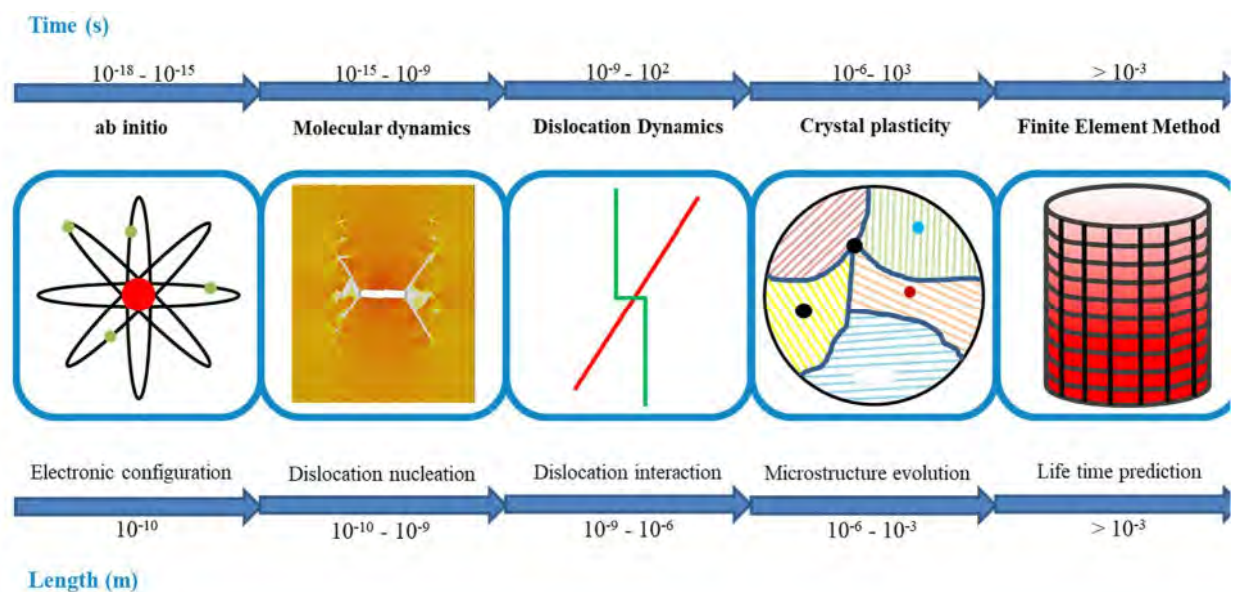


Рис. 1.10 Схема, що ілюструє мультимасштабні обчислювальні методи та їх часові й просторові масштаби. Адаптовано з роботи[13].

Мультимасштабні методи дозволяють вивчати явища на різних часових та просторових масштабах. У кожному масштабі використовуються свої

обчислювальні підходи. Немає універсального методу, що охоплює всі масштаби, тому дані передаються з нижчого рівня на вищий.

МД-розрахунки слугують мостом між атомістичним рівнем і макрорівнем, забезпечуючи вихідні дані для інших моделей, саме тому складні явища, як-от руйнування або взаємодія дислокацій з границями зерен, потребують комбінованих підходів. У данній роботі використовується саме пакет LAMMPS для розрахунків.

LAMMPS оптимізований для паралельних обчислень на суперкомп'ютерах і кластерах з тисячами процесорів. Він підтримує розподіл обчислень між процесорами за допомогою MPI, що дозволяє ефективно моделювати системи з мільйонами і навіть мільярдами атомів. Крім того, LAMMPS підтримує обчислення на GPU, що значно прискорює симуляції. Архітектура LAMMPS побудована модульно: різні типи потенціалів, інтеграторів, термостатів, баростатів, обмежень та інших компонентів реалізовані у вигляді окремих модулів. Це дає змогу користувачам легко комбінувати різні методи, адаптувати симуляції під конкретні задачі. LAMMPS підтримує численні потенціали: від класичних парних (Леннарда-Джонса, Кулона) до складних багатоатомних (EAM, Tersoff, MEAM). [14]

Особливістю LAMMPS є модульна архітектура, яка дозволяє легко розширювати функціонал за допомогою плагінів і пакетів, а також інтегруватися з іншими програмними продуктами для атомістичного моделювання, такими як AtomsK.[15] Це дає змогу швидко тестувати різні моделі та параметри без необхідності повного перепакування вхідних даних.

Візуалізація розрахунків в цій роботі проводилась в пакеті OVITO, його перевагами є візуалізація мільйонів атомів у реальному часі завдяки OpenGL. Аналіз структур: координатний аналіз, кластеризація, пошук дефектів. Побудова графічних зображень, відео та експорт до форматів,

сумісних із LAMMPS. Розширюваність через плагіни та скрипти на Python, включно з пакетною обробкою.

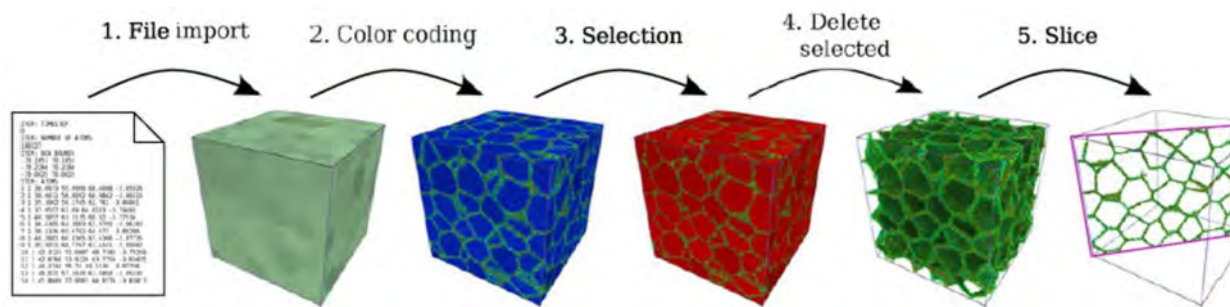


Рис. 1.11 Ілюстрація архітектури конвеєра обробки програмного забезпечення для візуалізації OVITO. Стрілки позначають окремі кроки обробки, які застосовуються до атомарних даних, що "протікають" через конвеєр обробки. Зображення зображують проміжні стани. Кінцевий стан даних відображається на екрані, експортується в новий файл даних або подається в зовнішній рендеринг для виведення зображень публікаційної якості. Адаптовано з роботи[16].

В статті [16] були використані наступні можливості програмного пакету: виявлення меж зерен за допомогою координатного аналізу, візуалізації зсувів атомів при деформації, побудови зображень із тіньовим освітленням для кращого 3D-сприйняття структури.

II. МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

2.1 Опис методу та об'єкту досліджень

У роботі атомістичне моделювання руху тріщини в карбіді кремнію з вуглецевими включеннями досліджується за допомогою методу молекулярної динаміки з використанням відкритого програмного коду LAMMPS. Об'єктами дослідження стали наступні структури: монокристалічний карбід кремнію (SiC), шарувата структура SiC з різними орієнтаціями. Відповідні атомні конфігурації модельованих систем показані на рис.2.1. Загальна кількість атомів в структурах для вивчення поширення тріщини складала близько 250 тисяч.

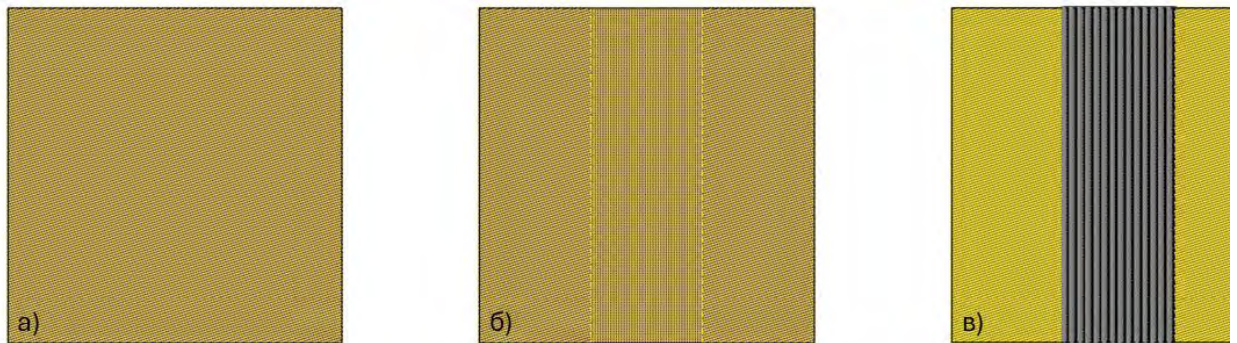


Рис.2.1. Атомні конфігурації монокристалічного SiC (а) шаруватого SiC (б) шаруватого SiC з графітовими включеннями (в)

Для моделювання шаруватої структури SiC (рис 2.1(б)) було створено модель, що складається з трьох шарів, кожен з яких має різну кристалографічну орієнтацію. Орієнтації зерен задані у вигляді напрямків осей X та Y за індексами Міллера: для лівого шару X-120, Y210; для центрального шару X110, Y-110; для правого шару X1-20, Y210. Межі між зернами утворюють кутові розбіжності орієнтацій ґратки, що дозволяє досліджувати вплив меж зерен на властивості матеріалу.

Для опису взаємодії між атомами Si та C використовувався потенціал Терзофа:

$$E = \sum_i \sum_{j>i} f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]$$

де

$f_c(r_{ij})$ – функція згладжування, що обмежує радіус взаємодії

$f_R(r_{ij}) = A \exp(-\lambda_1 r_{ij})$ – репульсивний член,

$f_A(r_{ij}) = -B \exp(-\lambda_2 r_{ij})$ – атрактивний член,

b_{ij} – фактор, що враховує кути між зв'язками, тобто багатоатомні ефекти).

Цей потенціал добре описує ковалентні зв'язки Si–C та C–C, які мають власну орієнтацію і сильну залежність від геометрії навколо атома.

У композиті карбиду кремнію та графіту використовувався також потенціал Терзофа, але для взаємодії між шарами графіту використовувався потенціал Ленард-Джонса:

$$E = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad r < r_c$$

де

r – відстань між атомами

ε – глибина потенціальної ями

σ – відстань, на якій потенціал дорівнює нулю

Шари графіту утримуються між собою слабкими ван-дер-Ваальсовими силами, які описуються потенціалом Ленарда-Джонса.

Для атомістичного моделювання процесу поширення тріщини на першому етапі створювався зародок тріщини шляхом видалення невеликої кількості атомів посередині лівого краю зразка (рис. 2.2).

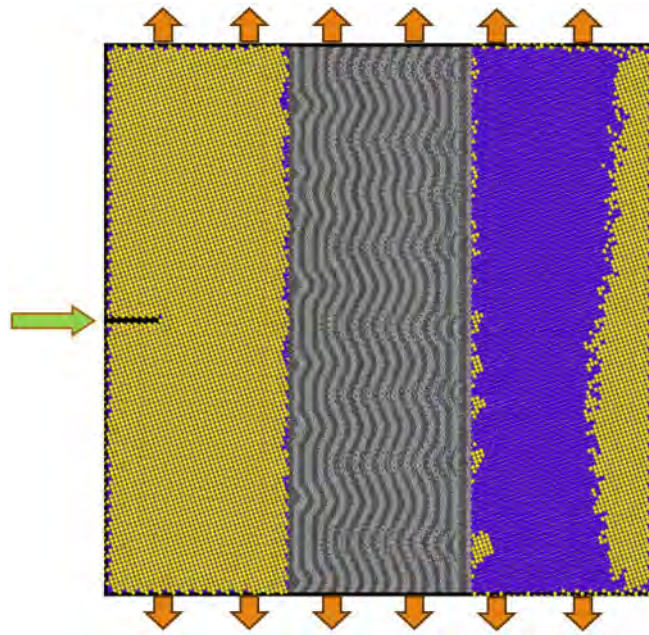


Рис 2.2 Схема моделювання процесу поширення тріщини в зразку композиту SiC–Gr

Для розрахунку напружень у зразку використовувався стрес-тензор за Віріалом:

$$\sigma_{nm} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \left(-m^{(i)} v_n^{2(i)} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N F_n^{(i)(j)} r_n^{(i)(j)} \right)$$

де

σ_{nm} – компонент тензора напружень

V – об'єм

N – кількість атомів

$m^{(i)}$ - маса i -го атома,

$v_n^{(i)}$ - n -та компонента швидкості i -го атома,

$F_n^{(i)(j)}$ - n -та компонента сили, з якою атом j діє на атом i ,

$r_n^{(i)(j)}$ - n -та компонента вектора, що з'єднує атоми i та j

Доданок $-m^{(i)} v_n^{2(i)}$ враховує рух атомів, тоді як $\frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N F_n^{(i)(j)} r_n^{(i)(j)}$ враховує сили взаємодії між атомами, сили $F_n^{(i)(j)}$ визначаються вибраним

потенціалом, для графіту використовується для розрахунку напружень всередині та між шарами, в роботі за цією формулою розраховувався модуль Юнга.

Зразки розтягували вздовж осі Y з різною швидкістю (від 10^8 до 10^9). Вздовж осей Y та Z застосовувалися періодичні граничні умови, а по осі X розміри були досить великими, при цьому граничні умови були неперіодичними. Модель працювала в NVE-ансамблі під час короткої фази рівноваги, коли не діяли сили, що змінюють енергію системи. Після цього систему переводили в NVT-ансамбль для зняття залишкових напружень і деформацій.

Отримані дані про напруження і відносну деформацію зберігали у текстових файлах, на основі яких будували графіки залежності напруження від деформації. Крім того, з певним інтервалом часу фіксували атомні конфігурації, які потім візуалізували за допомогою програми OVITO. За цими матеріалами досліджували процес розповсюдження тріщини та описували зв'язок між її пробігом і відотною деформацією.

2.2 Опис скрипту LAMMPS для моделювання руху тріщини

Задля моделювання руху тріщини в зразку було написано скрипт для програмного пакету LAMMPS. Розглянемо його на прикладі побудови структури шаруватого SiC з включеннями графіту.

```
dimension          3
boundary           p p p
units              metal
atom_style         atomic

variable           Lx equal 90
variable           Ly equal 90
variable           Lz equal 10
variable           Ll equal ${Lx}/3.0
```

Рис. 2.3 Загальні налаштування

В налаштуваннях моделі вказується тривимірна симуляція, задаються періодичні граничні умови по трьох осях задля створення ефекту нескінченної

системи, також задаємо величини вимірювання. Надалі надаємо розміри нашої системи.

```
variable      Tdamp equal 100*v_dt
variable      Pdamp equal 1000*v_dt
variable      Nrescale equal 10
variable      Window equal 1.0
variable      Fraction equal 0.5
variable      NVE_Equil equal 500000
variable      NPT_Equil equal 500000
variable      NVT_Equil equal 500000
variable      Ndeform equal round(v_Final_Strain/v_dt/abs(v_Strain_Rate))
variable      Nrun equal 200000
variable      Ndump equal 1000
variable      Nthermo equal 2*${Ndump}

shell         mkdir  ${results_path}/SiCGr
shell         mkdir  ${results_path}/SiCGr/Dump
```

Рис. 2.4 Задання параметрів системи

Далі в скрипті описуються параметри моделі: параметр демпфування, встановлення ансамблю NVE (збереження енергії), встановлення ансамблю NPT (збереження тиску та температури), встановлення ансамблю NVT (збереження об'єму), встановлюється кількість кроків що виконується у скрипті, а також проміжки в яких записуються атомні конфігурації структури, які записуються у вказану папку.

```
#-----GEOMETRY-----
#-----lattice-----
variable      latparam equal 4.35
lattice       custom ${latparam} origin 0.0 0.0 0.0 orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1 &
a1            1.0 0.0 0.0 &
a2            0.0 1.0 0.0 &
a3            0.0 0.0 1.0 &
basis         0.0 0.0 0.0 &
basis         0.5 0.0 0.5 &
basis         0.0 0.5 0.5 &
basis         0.5 0.5 0.0 &
basis         0.25 0.25 0.25 &
basis         0.75 0.25 0.75 &
basis         0.25 0.75 0.75 &
basis         0.75 0.75 0.25 &
#-----box-----
variable      x0 equal 0.0
variable      y0 equal 0.0
variable      z0 equal 0.0
region        Box block ${x0} ${Lx} ${y0} ${Ly} ${z0} ${Lz}
create_box    4 Box

#-----Layers-----
variable      xll equal (${Lx}-${L1})/2.0
variable      xlh equal (${Lx}+${L1})/2.0
#-----layer1-----
region        layer1 block ${x0} ${xll} ${y0} ${Ly} ${z0} ${Lz}
#-----layer2-----
region        layer2 block ${xll} ${xlh} ${y0} ${Ly} ${z0} ${Lz}
#-----layer3-----
region        layer3 block ${xlh} ${Lx} ${y0} ${Ly} ${z0} ${Lz}
```

Рис. 2.5 Створення кристалічної ґратки моделі

У наступному розділі задається загальна геометрія структури. Вводиться параметр ґратки, також орієнтації атомів та вектори трансляції ґратки. Описуються позиції атомів у базисі елементарної комірки. У блоці box задаються початкові координати симуляційної області, а далі створюється регіон у формі прямокутного паралелепіпеду, який складається з 3 шарів.

```
#-----Create atoms-----
#-----SiC-Layer1-----
variable latparam equal 4.35
lattice custom ${latparam} &
a1 1.0 0.0 0.0 &
a2 0.0 1.0 0.0 &
a3 0.0 0.0 1.0 &
basis 0.0 0.0 0.0 &
basis 0.5 0.0 0.5 &
basis 0.0 0.5 0.5 &
basis 0.5 0.5 0.0 &
basis 0.25 0.25 0.25 &
basis 0.75 0.25 0.75 &
basis 0.25 0.75 0.75 &
basis 0.75 0.75 0.25 orient x 1 -2 0 orient y 2 1 0 #orient x 1 1 0 orient y -1 1 0
create_atoms 1 region layer1 &
basis 1 1 &
basis 2 1 &
basis 3 1 &
basis 4 1 &
basis 5 2 &
basis 6 2 &
basis 7 2 &
basis 8 2

#-----Graphite-Layer2-----
variable v13 equal 1.0/3.0
variable v56 equal 5.0/6.0
variable v23 equal 2.0/3.0
variable v16 equal 1.0/6.0
variable agx equal 2.0*1.42*sqrt(3.0)/2.0
variable agy equal 3.0*1.42
variable agz equal 2.0*3.354
lattice custom 1.0 &
a1 ${agx} 0.0 0.0 &
a2 0.0 ${agy} 0.0 &
a3 0.0 0.0 ${agz} &
basis 0.0 0.0 0.0 &
basis 0.5 0.5 0.25 &
basis 0.5 ${v13} 0.25 &
basis 0.5 0.5 0.25 &
basis 0.5 ${v56} 0.25 &
basis 0.0 ${v13} 0.75 &
basis 0.0 ${v23} 0.75 &
basis 0.5 ${v56} 0.75 &
basis 0.5 ${v16} 0.75 orient x 1 0 1 orient z -1 0 1
create_atoms 1 region layer2 &
basis 1 3 &
basis 2 3 &
basis 3 3 &
basis 4 3 &
basis 5 4 &
basis 6 4 &
basis 7 4 &
basis 8 4

#-----SiC-Layer3-----
variable latparam equal 4.35
lattice custom ${latparam} &
a1 1.0 0.0 0.0 &
a2 0.0 1.0 0.0 &
a3 0.0 0.0 1.0 &
basis 0.0 0.0 0.0 &
basis 0.5 0.0 0.5 &
basis 0.0 0.5 0.5 &
basis 0.5 0.5 0.0 &
basis 0.25 0.25 0.25 &
basis 0.75 0.25 0.75 &
basis 0.25 0.75 0.75 &
basis 0.75 0.75 0.25 orient x 1 -2 0 orient y 2 1 0 #orient x 1 1 0 orient y -1 1 0
create_atoms 1 region layer3 &
basis 1 1 &
basis 2 1 &
basis 3 1 &
basis 4 1 &
basis 5 2 &
basis 6 2 &
basis 7 2 &
basis 8 2

mass 1 28.08 # Si
mass 2 12.01 # C
mass 3 12.01 # C
mass 4 12.01 # C
write_data ${results_path}/SiCGr/Init.data
```

Рис 2.6 Заповнення симуляційної області атомами

SiC-layer1 – створює атоми типу 1 (Si) і 2 (C) у регіоні layer1 (лівий шар).basis 1 1 - перша позиція базису(Si), basis 6 2 - шоста позиція базису(C).

Graphite-layer2 – створює атоми типу 3 (C) і 4 (C) у регіоні layer2 (центральний шар).basis 1 3 - перша позиція базису(C), basis 3 4 - третя позиція базису(C).

SiC-layer1 – повторює створення атомів з лівого шару у правому.

Також у цьому блоці задається маса для кожного типу атомів та записується початкова конфігурація системи у відповідний файл.

```
#-----FORCE FIELD-----
pair_style      hybrid tersoff lj/cut 5.75
pair_coeff      * * tersoff "/home/users/vshvernyk/Shvernyk/LAMMPS/Potentials/SiC.tersoff" Si C C C
pair_coeff      3 4 lj/cut 0.00455322987989 3.115205019
```

Рис. 2.7 Силове поле

Встановлюється комбінований стиль міжатомних взаємодій. Терзоф для зв'язку між атомами, а Ленард-Джонс для слабких взаємодій між шарами графіту, тобто між атомами типу 3 та 4, які вказувались в попередньому блоці

```
#-----INITIAL VELOCITIES-----
reset_timestep 0
velocity       all create ${Temperature} 541220 dist gaussian
fix            NVE all nve
run            0
thermo         ${Ndump}
min_style      cg
minimize       1e-18 1e-18 10000 10000
write_data     ${results_path}/SiCGr/Minimiz.data
unfix          NVE
```

Рис. 2.8 Задання початкової швидкості системи

У цьому блоці відбувається підготовка системи до симуляції: береться випадкове число для швидкості розподілення за Гауссовим законом, задається інтегрування рівнянь руху в NVE, встановлюється частота виводу термодинамічної інформації, встановлюється метод спряжених градієнтів,

записується мінімізована конфігурація атомів та знімається NVE ансамбль задля переходу до наступного етапу симуляції.

```
#-----EQUILIBRATION-----
reset_timestep      0
fix                 NPT all npt temp  ${Temperature}  ${Temperature}  ${Tdamp} iso 0.0 0.0 ${Pdamp}
run                 ${NPT_Equil}
unfix               NPT
write_data           ${results_path}/SiCGr/NPT-Equil.data

reset_timestep      0
fix                 NVT all nvt temp  ${Temperature}  ${Temperature}  ${Tdamp}
run                 ${NVT_Equil}
unfix               NVT
write_data           ${results_path}/SiCGr/NVT-Equil.data
```

Рис. 2.9 Рівноваження системи

Після цього встановлюємо інтегрування в ансамблі NPT і запускаємо симуляцію на визначену кількість кроків для досягнення рівноваги при фіксованих температурі та тиску. Знімається NPT ансамбль, записуються данні, встановлюється NVT ансамбль повторюючи процедуру.

```
#-----crack-----
reset_timestep      0
change_box          all boundary s p p #    s s p
variable            crackhigh equal  ly/60
variable            cracklenght equal  lx/10.0
variable            boundaryhigh equal  ly/20.0
variable            topbound equal  yhi-${boundaryhigh}
variable            botbound equal  ylo+${boundaryhigh}
variable            dell equal  (ly-${crackhigh})/2.0
variable            delh equal  (ly+${crackhigh})/2.0
region              lower block INF INF INF ${botbound} INF INF units box
group               lower region lower
region              upper block INF INF ${topbound} INF INF INF units box
group               upper region upper
group               boundary union lower upper
group               mobile subtract all boundary
region              crack block INF ${cracklenght} ${dell} ${delh} INF INF units box
delete_atoms        region crack
write_data           ${results_path}/SiCGr/Pre-Crack.data

#-----DEFORMATION-----
reset_timestep      0
variable            tmp equal  "ly"
variable            l0y equal  ${tmp}
```

Рис. 2.10 Утворення тріщини в зразку

У цьому блоці описується задана тріщина, а саме: створюється окремий регіон з якого видаляються атоми, тим самим створюючи порожнину яка є зародком тріщини. Записуються данні атомної конфігурації.

```

#-----DEFORMATION-2 (Strain_Rate)
fix                NVE all nve
fix                Deform all deform 1 y erate ${Strain_Rate} units box
variable            strain equal "(ly-v_l0y)/v_l0y"
variable            str equal "v_strain"
variable            px equal "-pxx/10000"
variable            py equal "-pyy/10000"
variable            pz equal "-pzz/10000"
compute            stress all stress/atom NULL
fix                Print all print ${Ndump} "${str} ${px} ${py} ${pz}" file ${results_path}/SiGr/Strain-Stress.dat screen no
dump               DUMP all custom ${Ndump} ${results_path}/SiGr/Dump/${name}.* id type x y z vx vy vz c_stress[1] c_stress[2] c_stress[3]
c_stress[4] c_stress[5] c_stress[6]
dump_modify        DUMP element Si C C C
run                ${Ndeform}

```

Рис. 2.11 Початок деформації зразку

В останньому блоці скрипту задається деформація розтягу боксу по осі Y з заданою швидкістю, вводиться змінна strain яка обчислює поточну відносну деформацію по осі Y, вводяться змінні rxx, руу, rzz які відповідають за тензор напружень для кожного атома. Ці значення записуються у відповідний файл із заданим кроком. Далі вказуються типи атомів та запускається моделювання на вказану кількість кроків.

III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Результати моделювання одновісного розтягу шаруватих композитів на основі SiC

Моделювані в роботі структури на основі SiC спершу піддавалися одновісному розтягу і для них виконувався розрахунок кривих напруження-деформація. В усіх випадках використовувалися структури із зародком тріщини, що розвивався в процесі деформації. Відповідні результати для трьох досліджуваних структур показані на рис.3.1. Всі криві були отримані при фіксованій швидкості деформації $\dot{\epsilon} = 10^8 \text{ c}^{-1}$.

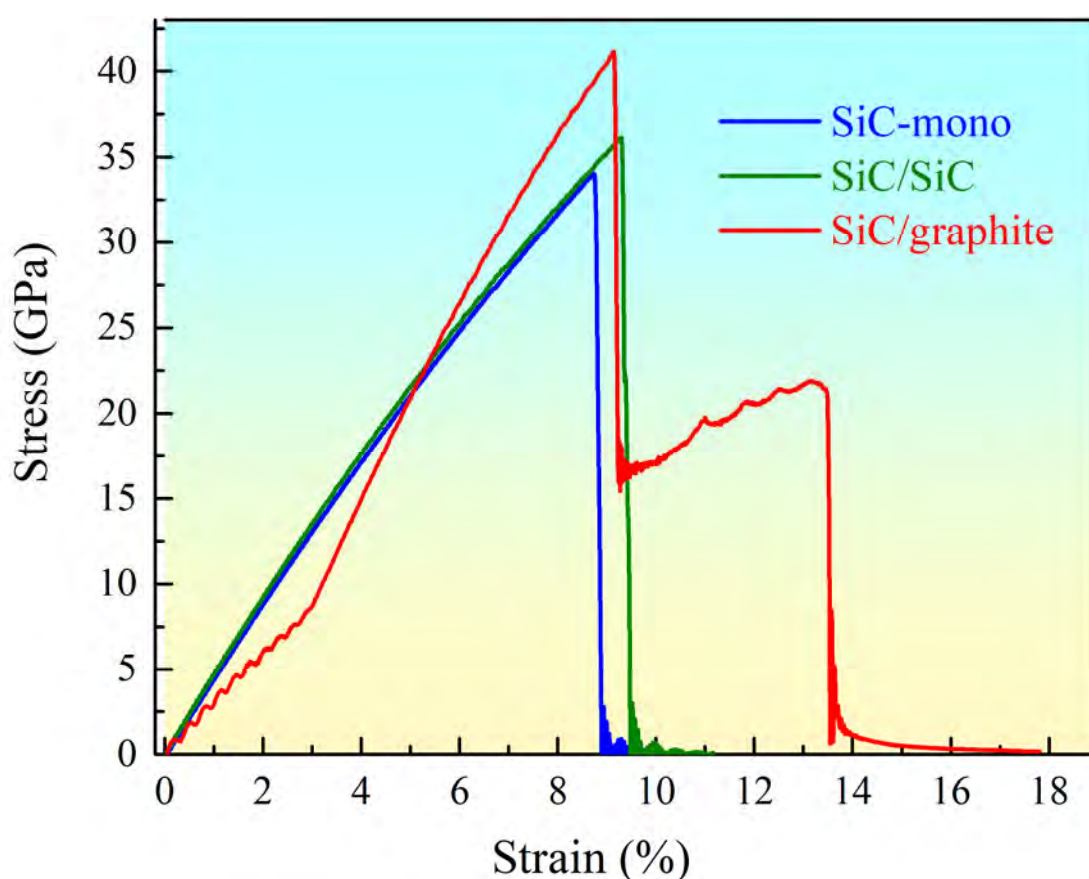


Рис. 3.1. Криві напруження-деформація для досліджуваних зразків: монокристалічний SiC, шарувата структура SiC/SiC та шарувата структура SiC/графіт. Швидкість деформації $\dot{\epsilon} = 10^8 \text{ c}^{-1}$.

З наведених залежностей видно, що для монокристалічного карбіду кремнію початкова ділянка залежності напруження-деформація є лінійною. За тангенсом кута нахилу даної ділянки (область деформацій до 2%) в роботі визначався модуль Юнга матеріалу. Отримане значення становило близько 450 ГПа, що лежить в діапазоні експериментальних значень 390-470 ГПа, які зустрічаються в літературі. Це вказує на коректність обраного потенціалу для опису міжатомної взаємодії. Після досягнення критичного напруження відбувається майже миттєве зменшення напружень до нуля, що свідчить про руйнування зразка без помітної пластичної деформації, тобто має місце крихкий механізм руйнування, притаманний для кристалів з ковалентним типом зв'язків.

В структурі, що містить шари карбіду кремнію з різною кристалографічною орієнтацією, крива одновісного розтягу має такий же вигляд. Але в цій модельній структурі руйнування відбувається при дещо більшій деформації і відповідному напруженні. Такий результат можна охарактеризувати тим, що тріщині необхідна більша енергія для подолання границі поділу SiC/SiC.

Щодо структури карбіду кремнію з графітом, то для неї залежність має певні відмінності. По-перше, початкова ділянка кривої має менший нахил, ніж в SiC і спостерігаються певні осциляції. Це пов'язано з тим, що при одновісній деформації відбувається зменшення відстані між графітовими шарами та релаксація структури. Далі нахил збільшується, що відповідає розтягу структури як цілої. Максимальне напруження, яке досягається в цьому зразку є приблизно на 15% вищим, ніж у моделях без графіту. Далі, при деформації близько 10% спостерігається різке зменшення напружень, що відповідає початковому руху тріщини через перший шар карбіду кремнію. Подальша деформація супроводжується зростанням напружень, що можна пояснити гальмуванням тріщини на межі поділу графіт/карбід кремнію. Вдруге різке зменшення напружень виникає при деформації близько 14%, що майже в

півтора рази більше, ніж для зразка без графіту. Цей стан відповідає випадку, коли тріщина пройшла в другий шар SiC, тобто руйнуванню всього зразка.

Важливим параметром, від якого залежить вигляд кривих-напруження і особливості процесу руйнування зразка є швидкість деформації. Зважаючи на це, в роботі досліджувалися криві розтягу зразків при різному значенні швидкості їх деформації. Відповідні результати для зразка SiC/графіт, отримані з трьома швидкостями деформацій показано на рис.3.2

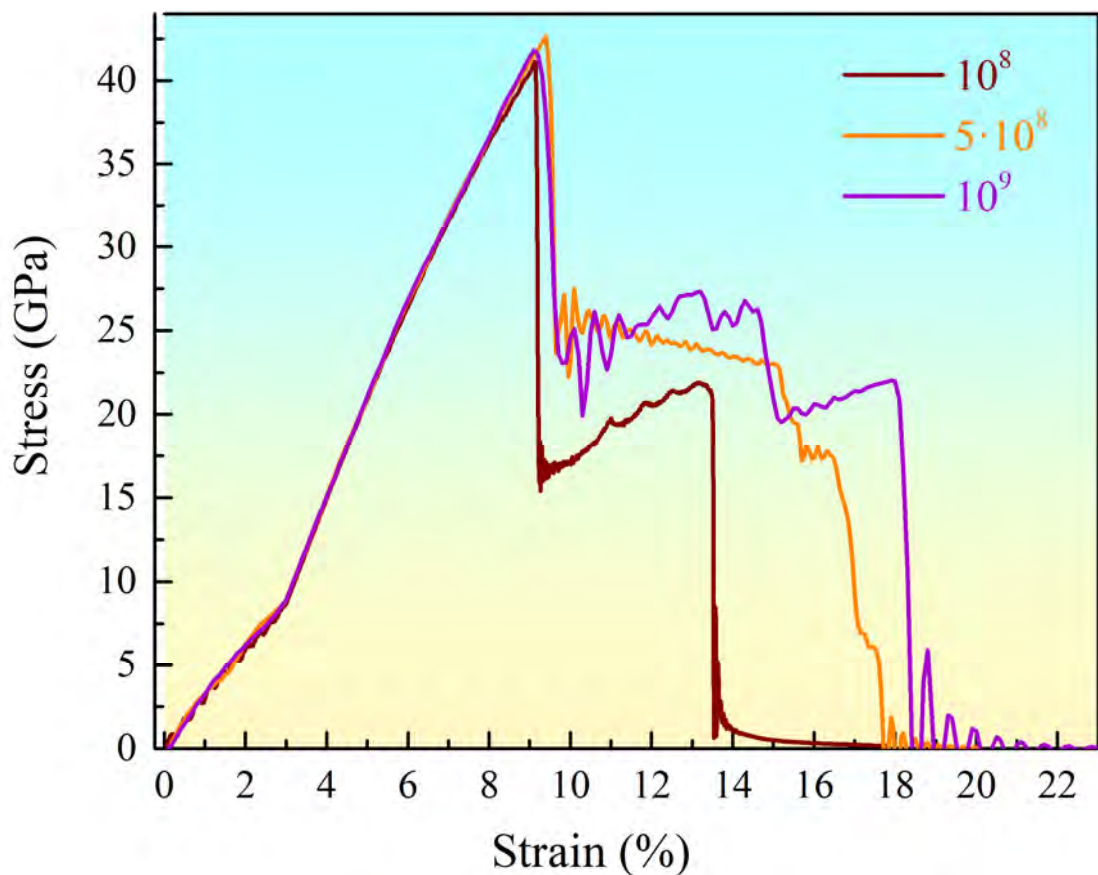


Рис.3.2. Криві напруження-деформація для зразка SiC/графіт, отримані при швидкостях деформації $\dot{\epsilon} = 10^8 \text{ c}^{-1}$, $5 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$, 10^9 c^{-1} .

Видно, що зі збільшенням швидкості деформації початкова ділянка кривих майже не змінюється, тобто в області пружної деформації матеріал є нечутливим до кінетики одновісного розтягу. Однак, в області вищих напружень, коли досягаються стартові напруження для руху тріщини, помітними стають відмінності у кривих напруження-деформація. Вони

полягають в тому, що зі зростанням швидкості деформації зростає і напруження руйнування структури. Цей результат, згідно існуючих літературних даних, обумовлений тим, що при більшій швидкості деформації в матеріалі генерується вища густина дислокацій, які слугують стопорами для руху тріщини. Крім того, в інтервалі між стартом руху тріщини та повним руйнуванням зразка спостерігаються осциляції напружень. Це відповідає розвитку тріщини всередині графіту, що супроводжується руйнуванням окремих вуглецевих зв'язків в графітових шарах.

3.2. Механізми руйнування структур на основі карбїду кремнію з графітовими шарами

Створення якісних керамічних композитів, здатних працювати в умовах ударних навантажень, потребує розуміння на атомарному рівні особливостей поширення тріщин, що виникають в матеріалі. У зв'язку з цим, одним із завдань роботи було з'ясування механізмів поширення тріщини в шаруватих структурах і проведення порівняльного аналізу. З цією метою при моделювання одновісного розтягу структур періодично виконувався запис координат всіх атомів у текстові файли, після чого здійснювалася візуалізація процесу поширення тріщини за допомогою пакету OVITO.

На рис. 3.3 показані результати візуалізації для зразка SiC/SiC, отримані при одновісному розтягу на швидкості деформації $\dot{\epsilon} = 10^8 \text{ c}^{-1}$. Бачимо, що зародок тріщини залишається нерухомим в широкому інтервалі деформацій (орієнтовно до 9,2%). При досягненні деформації 9,2% в матеріалів створюється механічне напруження, достатнє для руху тріщини. Внаслідок цього біля вістря тріщини спостерігається швидке руйнування міжатомних зв'язків. Як наслідок, в діапазоні деформацій до 9,4% тріщина швидко поширюється через перший шар карбїду кремнію і досягає межі поділу шарів.

Помітної затримки на границі між шарами з різною кристалографічною орієнтацією не відбувається, тому тріщина продовжує свій рух практично без зміни напрямку і при деформації 9,9% руйнується другий шар структури. Після цього тріщина проходить другу межу поділу SiC/SiC і при деформації близько 10,1% вся структура виявляється зруйнованою. Таким чином, в даній моделі не проявляється помітного ефекту затримки тріщини на границях поділу і її рух відбувається майже без зміни напрямку розповсюдження.

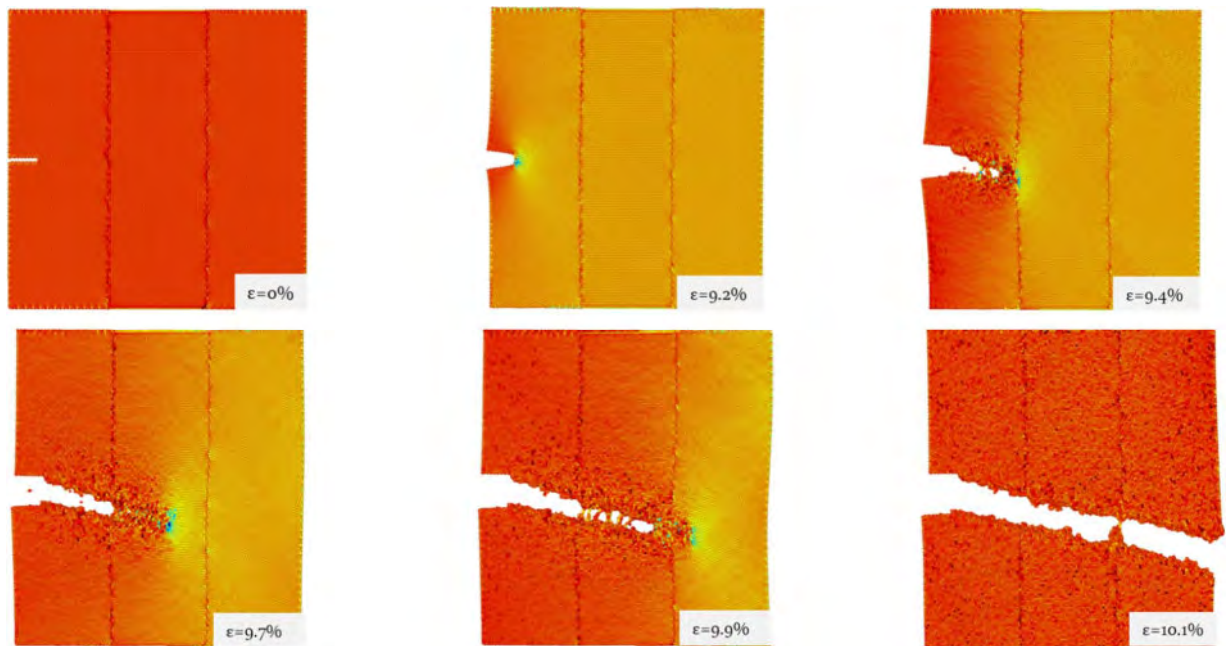


Рис.3.3. Атомні конфігурації структури SiC/SiC в процесі одновісного розтягу на швидкості деформації $\dot{\epsilon} = 10^8 \text{ c}^{-1}$

Цей же процес в структурі з графітовим шаром загалом виглядає по-іншому. Зокрема, момент початку руху тріщини в першому шарі дещо зміщений в бік вищих деформацій, що в даному випадку становить майже 9,5%. Як і для попередньої структури, вістря тріщини практично миттєво досягає межі поділу з графітом. Після цього тріщина на певний час гальмується і при подальшій деформації розтягу починається руйнування окремих шарів графіту. Як було показано у попередньому підрозділі, цей процес проявляється на кривих-напруження у вигляді осциляцій механічних

напружень. Цей процес триває аж до тих пір, поки деформації не стануть рівними близько 13,8%. За таких умов, частина шарів графіту все ще зберігають цілісність, однак відбувається зародження і швидкий ріст тріщини в другому шарі карбіду кремнію, тобто генерується вторинна тріщина, швидко поширення якої зумовлює руйнування структури.

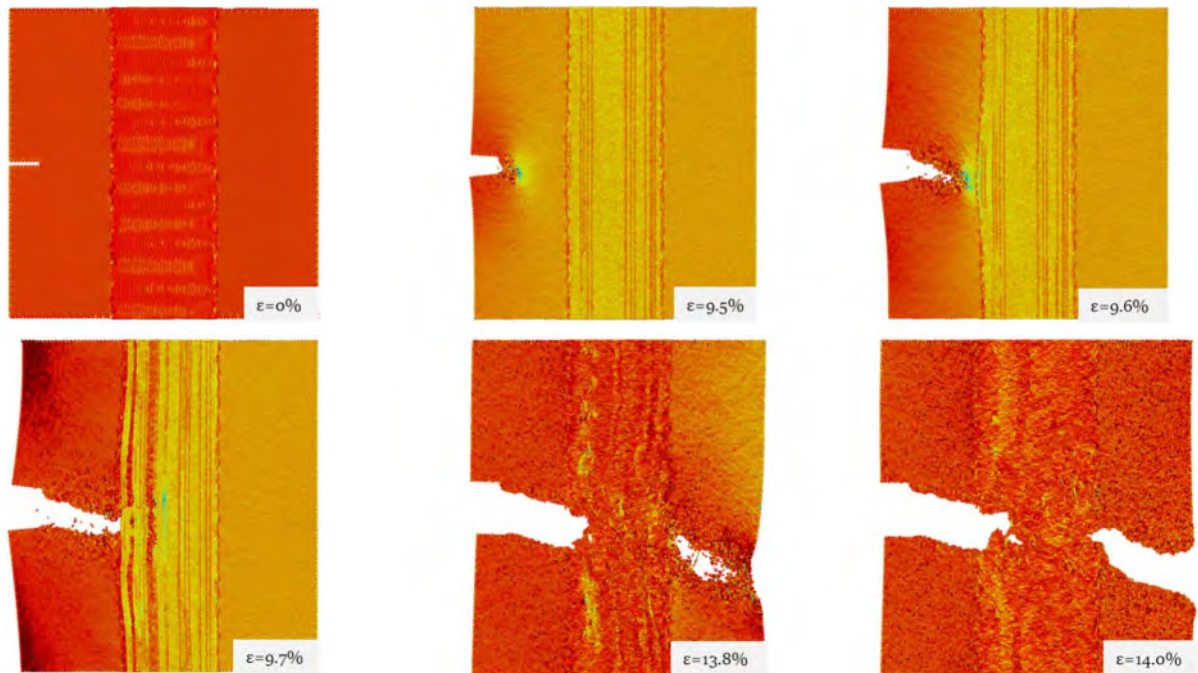


Рис.3.4. Атомні конфігурації структури SiC/графіт в процесі одновісного розтягу на швидкості деформації $\dot{\epsilon} = 10^8 \text{ c}^{-1}$

Таким чином, результати даного розділу свідчать про те, що в структурі на основі карбіду кремнію з м'яким графітовим включенням реалізується затримка розвитку тріщини на межі поділу SiC/графіт. Водночас, має місце і трансформація механізму руйнування: замість поширення первинної тріщини, в структурі з графітом матеріал руйнується внаслідок зародження та руху вторинної тріщини у шарі SiC, що лежить після графітового включення.

3.3. Визначення пробігів тріщини у структурах на основі карбіду кремнію.

На основі отриманих атомних конфігурацій, в роботі розраховувався пробіг тріщини для кожного з модельованих зразків. Для цього на початковому етапі фіксувалася координата переднього краю зародка тріщини. В процесі поширення тріщини на певних кроках визначалися оновлені координати вістря тріщини і за цими даними обчислювався пробіг тріщини. Дослідження виконували на всіх модельних зразках при різних швидкостях деформації.

На рисунку 3.5 представлено результати вимірювань пробігу тріщини в зразках при одновісному розтягу на швидкості деформації $\dot{\epsilon} = 10^8 \text{ c}^{-1}$. Для вибраних умов навантаження, пробіг тріщин є нульовим до деформацій близько 9%. Першою починає рухатися тріщина в монокристалічному карбіді кремнію і величина її пробігу дуже стрімко зростає від нуля до майже 35 нм. Це відповідає розміру зразка в напрямку руху тріщини і означає, що вістря миттєво прошиває весь зразок. Для шаруватої структури карбід кремнію залежність є аналогічною, але стартова деформація є дещо більшою. Після старту пробіг тріщини також досягає значення 35 нм при невеликій зміні деформації (в межах 0,5%). Ці дані узгоджується з результатами підрозділу 3.2. Нарешті, для структури з графітовим шаром бачимо, що стартова деформація практично не відрізняється від двох інших зразків, але після початку руху пробіг тріщини зростає лише до 22 нм і в області деформацій від майже 9% до 13% залишається незмінним. Це означає, що за таких умов розвиток тріщини зупиняються і вона залишається нерухомою. Виходячи з геометричних параметрів досліджуваних зразків, вказана відстань відповідає межі поділу карбід кремнію / графіт, на якій і відбувається зупинка тріщини. Подальша деформації зумовлює накопичення пружної енергії в зразку і вище деформації 13% її величина стає достатньою для подолання тріщиною

енергетичного бар'єру на межі поділу. Як наслідок, пробіг тріщини знову стрімко збільшується і досягає 35 нм вище деформації 13%.

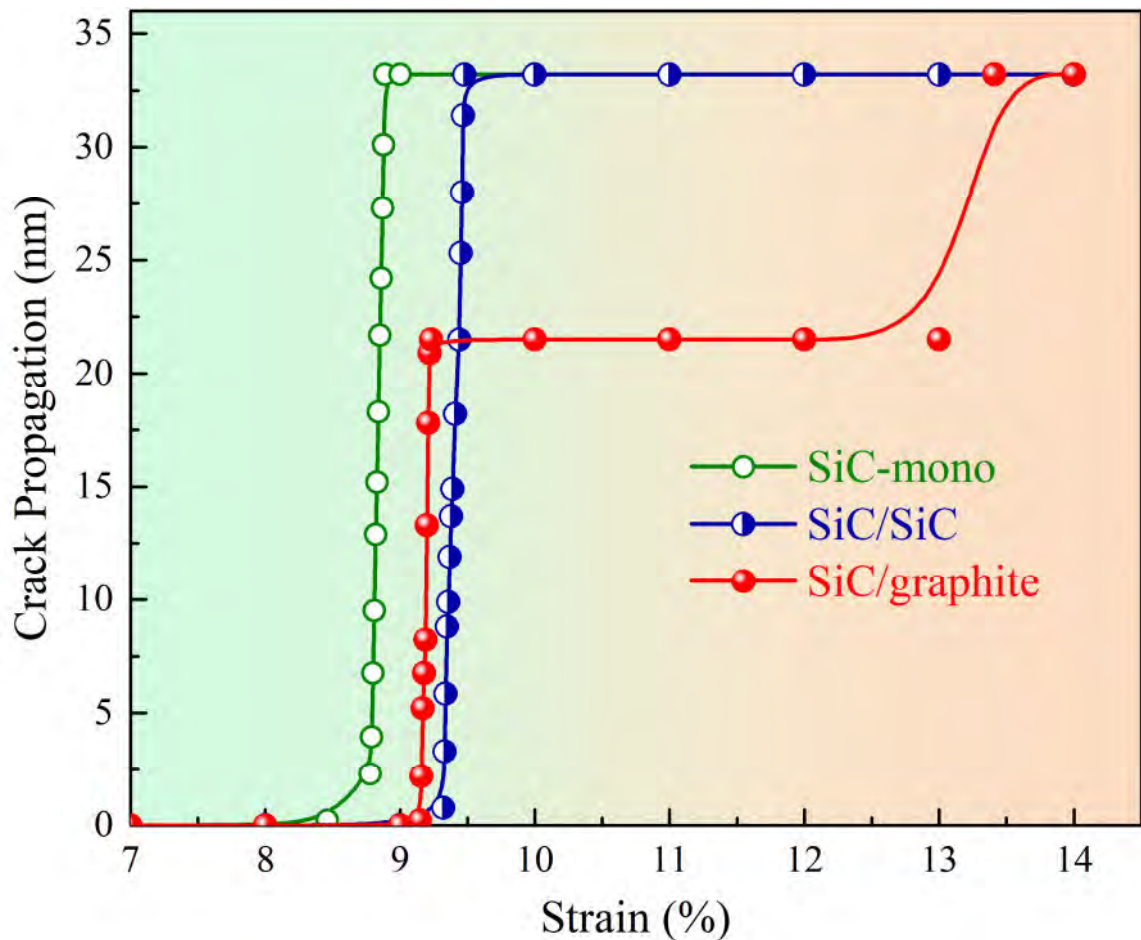


Рис. 3.5. Пробіги тріщин в досліджуваних зразках: монокристалічний SiC, шарувата структура SiC/SiC та шарувата структура SiC/графіт. Швидкість деформації $\dot{\epsilon} = 10^8 \text{ c}^{-1}$.

При вищих швидкостях деформації деформації затримка розвитку тріщини стає ще більш вираженою (рис. 3.6). В цьому випадку після початку руху, тріщина гальмується і до деформацій майже 17% залишається нерухомою. Тобто, в такій структурі з графітом можливе ефективне гальмування руху тріщин, що вказує на перспективність керамічних композитів з м'якими графітовими включеннями для розробки на їх основі бронезахисних конструкцій.

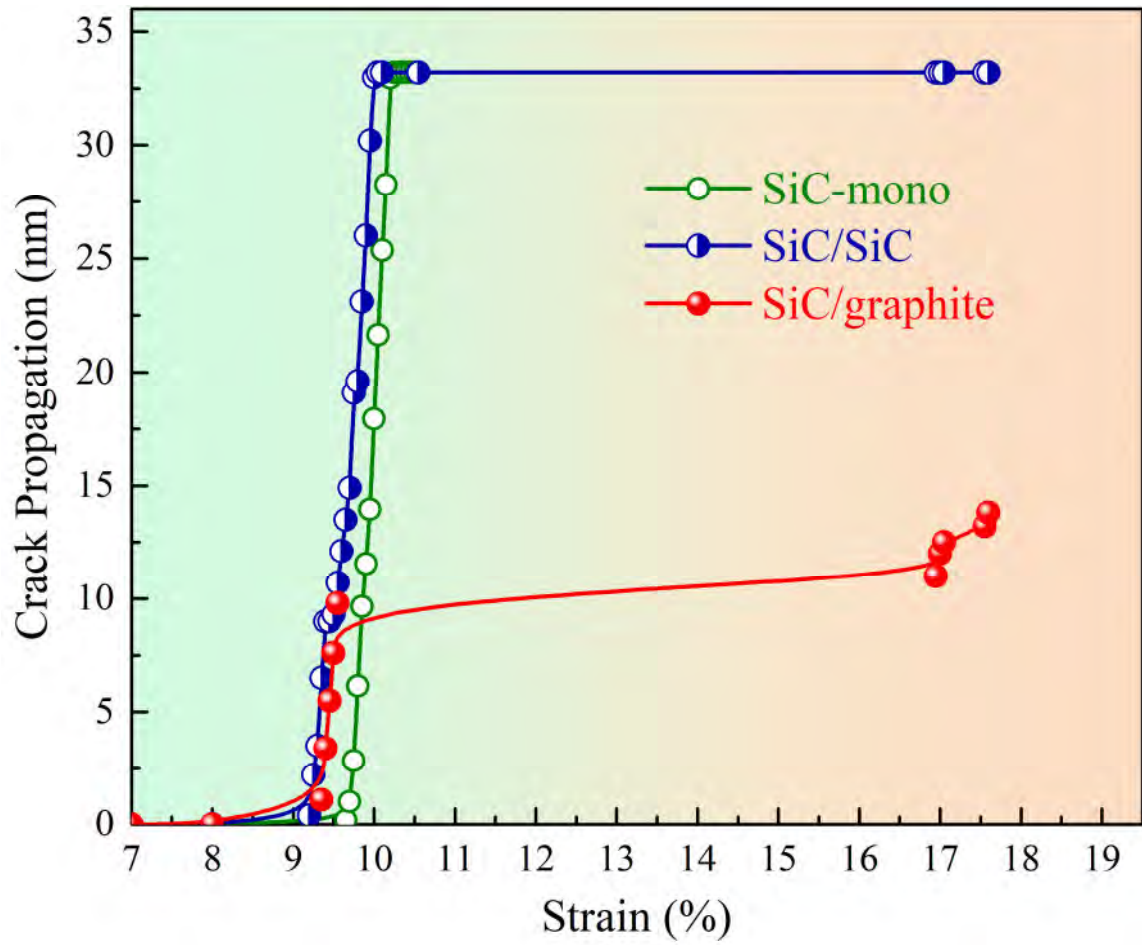


Рис. 3.6. Пробіги тріщин в досліджуваних зразках: монокристалічний SiC, шарувата структура SiC/SiC та шарувата структура SiC/графіт. Швидкість деформації $\dot{\epsilon} = 5 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$.

ВИСНОВКИ

1. Змодельовано рух тріщини в структурах на основі карбіду кремнію та графіту. Показано, що крива напруження-деформація композиту з графітовим шаром суттєво відрізняється від аналогічних залежностей для структур SiC без графіту як на ділянці пружної деформації, так і в області руйнування.

2. Показано, що деформація руйнування в зразку з графітовим шаром є майже в 1,5 рази вищою, ніж в монокристалічному чи шаруватому SiC. Це пов'язано з гальмуванням вістря тріщини на межі поділу графіт/карбід кремнію.

3. Встановлено, швидкість деформації суттєво впливає на рух тріщини в структурі SiC/графіт. Показано, що зі зростанням швидкості деформації відбувається збільшення напруження руйнування матеріалу. Даний ефект пов'язано зі збільшенням густини дислокацій, які слугують стопорами для руху тріщини.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1]. Farib D. Silicon carbide: a versatile material with wide-ranging applications // *Advanced Materials Science Research*. – 2024. – Vol. 7, No. 1. – С. 131–132
- [2]. Towards vertical Schottky diodes on bulk cubic silicon carbide (3C-SiC) / F. Roccaforte et al. *Applied Surface Science*. 2022. P. 154896.
- [3]. Ballistic ceramics and analysis of their mechanical properties for armour applications: A review / A. B. Dresch et al. *Ceramics International*. 2020.
- [4]. Larsen B., Netto K., Aisbett B. The Effect of Body Armor on Performance, Thermal Stress, and Exertion: A Critical Review. *Military Medicine*. 2011. Vol. 176, no. 11. P. 1265–1273.
- [5]. Silicon Carbide Properties: A Summary. *Advanced Ceramic Materials (ACM) | High-Quality Technical Ceramics Supplier*.
- [6]. Lawn B. R. Indentation of Ceramics with Spheres: A Century after Hertz. *Journal of the American Ceramic Society*. 2005. Vol. 81, no. 8. P. 1977–1994.
- [7]. Mosaic ballistic ceramics: A review / A. B. Dresch et al. *Journal of Alloys and Compounds Communications*. 2024. Vol. 3. P. 100012.
- [8]. Investigation on the ballistic behavior of mosaic SiC/UHMWPE composite armor systems / D. Hu et al. *Ceramics International*. 2017. Vol. 43, no. 13. P. 10368–10376.
- [9]. Enhanced bi-layer mosaic armor: experiments and simulation / Z.-N. Zhao et al. *Ceramics International*. 2020. Vol. 46, no. 15. P. 23854–23866.

- [10]. Sainath G., Nagesha A. Atomistic Simulations of Twin Boundary Effect on the Crack Growth Behaviour in BCC Fe. *Transactions of the Indian National Academy of Engineering*. 2021.
- [11]. Multiscale modeling of interfacial mechanical behaviours of SiC/Mg nanocomposites / X. Zhou et al. *Materials & Design*. 2019. Vol. 182. P. 108093.
- [12]. Jing X., Dong W. S. Dynamic Response of Magnesium Alloy and its Nanocomposite under High Strain Rate Compressive Loading. *Applied Mechanics and Materials*. 2013. Vol. 394. P. 20–25.
- [13]. Kedharnath A., Kapoor R., Sarkar A. Classical molecular dynamics simulations of the deformation of metals under uniaxial monotonic loading: A review. *Computers & Structures*. 2021. Vol. 254. P. 106614.
- [14]. LAMMPS - A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales / A. P. Thompson et al. *Computer Physics Communications*. 2021. P. 108171.
- [15]. AtomsK - Tutorial - LAMMPS. *AtomsK*.
- [16]. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2009. Vol. 18, no. 1. P. 015012.