**Гайнутдинов, Игорь Имильевич.**

## Моделирование структурно-химического состояния твердого тела при механической активации методом молекулярной динамики : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.21. - Новосибирск, 1999. - 112 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Гайнутдинов, Игорь Имильевич

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1. СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ВЕЩЕСТВЕ, ПОДВЕРГНУТОМ ИНТЕНСИВНОМУ МЕХАНИЧЕСКОМУ ВОЗДЕЙСТВИЮ (МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ)

1.1. мезоструктурные последствия механического воздействия на твердое тело

1.1.1. Процесс механической активации

1.1.2. Критическое состояние вещества

1.1.3. Эволюция мезоструктуры во время пластической деформации металлов

1.1.4. Вязко-хрупкий переход

1.2. Структурные последствия МА

1.2.1. Формирование новой структуры при механической обработке оксидов со структурой шпинели и перовскита

1.2.2. Сплавообразование при механической обработке металлов

1.3. Краткое резюме по литературным данным

ГЛАВА 2. МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ, РАЗУПОРЯДОЧИВАЕМЫХ ВНЕШНИМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ

2.1. Метод молекулярной динамики

2.2. Моделирование пластической деформации

2.3. Построение Вороного-Делоне

ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТЕЛ В УСЛОВИЯХ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_61

3.1. Двумерная система частиц, взаимодействующих посредством потенциала Леннарда-Джонса

3.1.1. Расчетная модель

3.1.2Моделирование деформации

3.2. Модельная ионная система АВ203

3.2.1. Двумерная система АВ20з

3.2.2 Основные результаты расчетов

3.3. Трехмерная система частиц Леннарда-Джонса

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ВЫВОДЫ

ЛИТЕРАТУРА