

## Анотація

Об'єктами нанотехнологій є наночастинки, нанопорошки, нанотрубки, нановолокна, наноплівки, які характеризуються розмірами до 100 нм. Нанонаука не може у всіх випадках спиратися ні на класичну механіку суцільних середовищ, ні на положення статистичної термодинаміки. Нановолокна і композити на їх основі привертають до себе увагу, завдяки своїм незвичайним механічним і електрофізичним властивостям, а також різноманіттю перспектив їх практичного застосування.

В даний час роботи обмежуються, в основному фундаментальними дослідженнями. Це відбувається, зокрема, з-за складності маніпулювання об'єктами такого масштабу. Робота по отримання та дослідження структури і різних варіантів застосування нановолокон є однією з найбільш актуальних завдань сучасної науки. Метод молекулярної динаміки добре зарекомендував себе при перевірці висновків різних теорій. Даний метод дозволяє розрахувати будь-які властивості системи, як термодинамічні (наприклад, енергію, тиск, ентропію), так і кінетичні (коефіцієнти дифузії, частоти коливань атомів), причому в даному методі є можливість порівнювати динаміку досліджуваних процесів з реальним часом. Головним недоліком методу, у порівнянні з іншими, є великі витрати машинного часу, необхідні для виконання розрахунків.

Розвинені останнім часом можливості обчислювальної техніки дозволили використовувати методи комп'ютерного моделювання для дослідження механізмів міграції атомів і трансформації структури при температурно-силових впливах, що вимагають більш тривалих і щодо складних комп'ютерних експериментів. Багато нановолокна і сплави мають унікальні властивості. Якщо розглядати властивості частинок матеріалу, що мають розміри порядку десятків і сотень нанометрів, то в таких частинках у порівнянні з великими об'єктами зростає частка поверхневих атомів або молекул в порівнянні з атомами (Молекулами) в обсязі. Це впливає на властивості частинок в цілому. Електричні, магнітні, механічні та деякі інші властивості матеріалу, що складається з наночасток, перестають бути постійними і починають залежати від форми частинок, розмірів, при різних температурах і наявності різних типів дефектів і недосконалостей. Відомо, що структурно-енергетичні перетворення в процесі деформації мають свою стадійність. Кожна стадія відрізняється типом утворюються дефектів і характером взаємодії між ними.

Представлене дослідження, із залученням методу молекулярної динаміки, структурно-енергетичних перетворень в нановолокна чистих ГЦК металів Ni і сплаву Ni<sub>3</sub>Fe, залежно від їх конфігурації, форми і розмірів, в процесі високошвидкісної деформації одноосного розтягування при різних температурах є актуальним.

## Annotation

The urgency of the problem. The objects are nanotechnology nanoparticles, nanopowders, nanotubes, nanowires, nanofilms, which characterized up to 100 nm. Nanoscience may not in all cases nor rely on classical continuum mechanics, nor the provisions of statistical thermodynamics. Nanofibres and composites based on them attract attention due to their unusual mechanical and electrophysical properties, as well as the diversity of their prospects practical application. Work is

currently limited in mainly in basic research. This occurs, in particular, iz the difficulty of manipulating objects of this magnitude. Work on preparation and study of the structure and various applications nanofibers is one of the most urgent problems of modern science. Molecular dynamics method has worked well when checking conclusions of the various theories. This method allows us to calculate any properties System as thermodynamic (e.g., energy, pressure, entropy), so and kinetic (diffusion coefficients, frequency of atomic vibrations), and in This method is possible to tailor the dynamics of the studied Processes with real time. The main disadvantage of the method, compared with the other is the high cost of computer time required for performing calculations increased recent opportunities computer technology have made the use of computer techniques simulation for the study of mechanisms of migration of atoms and transformation of the structure when the

temperature and force effects requiring more extensive and relatively sophisticated computer experiments. Many nanofibers and alloys have unique properties. If consider the properties of the material particles having a size of tens of and hundreds of nanometers, in such particles compared to larger objects increasing the proportion of surface atoms or molecules in comparison with atoms (Molecules) in volume. This affects the properties of the particles as a whole. Electric, magnetic, mechanical and other properties of some material comprising nanoparticles cease to be constant and become dependent on the shape particle sizes at different temperatures and the presence of any type of defects and imperfections. It is known that structural and energy conversion process strain have their staging. Each stage is different type produced defects and the character of interaction between them. The present study, involving the method of molecular dynamics, structure

and energy transformations in pure nanofibres Fcc metals Ni and alloy Ni<sub>3</sub>Fe, depending on their configuration, shape, and size during high-speed deformation uniaxial stretching at different temperatures it is important.

