

## ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ УПОРЯДОЧЕННЫХ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ СПЛАВОВ, ПОДВЕРГНУТЫХ ОДНООСНОМУ ИЛИ ВСЕСТОРОННЕМУ СЖАТИЮ

Баранов М. А., Черных Е. В., Дубов Е. А., Старостенков М. Д.

*Алтайский государственный технический университет, Барнаул, Россия,  
genphys@aetu.sccna.ru*

При обработке металлов и сплавов необходимо воздействие на них высокими давлениями. В результате такого воздействия материалы испытывают пластическую деформацию, в процессе которой возникают разнообразные дефекты, в том числе и плоские. Некоторые из этих дефектов могут оказаться энергетически выгодными. Результаты воздействия высоких давлений на материал, как правило, удается наблюдать только после снятия внешних нагрузок. Понимание же процессов, которые происходят в кристаллах, может быть достигнуто путем построения как адекватных моделей кристалла, так и процессов, симулирующих высокие давления.

Предлагаемая модель, как и большинство эмпирических моделей [1, 2], строится на основе данных о сплавах, их компонентах, находящихся в равновесном состоянии. В этой связи экстраполяция результатов на высокие давления может быть проведена, исходя из свойств равновесного кристалла. Состояние кристаллической решетки вблизи плоского дефекта характеризуется как энергией образования, так и локальной структурой распределения атомов вблизи него. Энергия образования плоского дефекта рассчитывается в традиционном подходе [3]. В компьютерном эксперименте исследуемый блок кристалла представлялся упаковкой 80 плоскостей определенной ориентации. За пределами 80 плоскостей с каждого края добавлялось по 20 атомных плоскостей, к которым прикладывались жесткие граничные условия. В перпендикулярных направлениях к блоку кристалла прикладывались периодические граничные условия. Давление в кристалле задавалось посредством изменения на соответствующую величину параметра решетки кристалла. После достижения определенного давления упаковка 20 плоскостей жестко фиксировалась. Релаксация кристалла при определенном давлении конечной конфигурации выполнялась по методу вариационной квазистатики. Атомам в блоке кристалла из 80 плоскостей позволялось смещаться до достижения минимума его потенциальной энергии при температуре, соответствующей ОК.

С использованием модели парных межатомных потенциалов, обеспечивающих стабильность сверхструктур  $D0_{19}$  и  $D0_{24}$ , рассчитаны атомные конфигурации и энергии образования плоских дефектов различной ориентации. Получены зависимости энергии образования плоских дефектов от величины давления, приложенного вдоль главной оси кристалла, и величины давления всестороннего сжатия. Проведенные исследования показали возможность структурных и сверхструктурных фазовых переходов в рассматриваемых сплавах в зависимости от типа и характера внешнего деформационного воздействия на материал.

*Работа выполнена при поддержке гранта Министерства образования Российской Федерации PD 02-1.2-31.*

1. Girifalco L.A., Weizer V.G., Phys. Rev. 1959. v. 114. p. 687-698.
2. Foiles S.M., Daw M.S., Sandia, Sand 86-8874, 1987.
3. Baranov M.A., Starostenkov M.D., Nikiforov A.G., Computation Mat. Science. 1999. v. 14. iss. 1-4. p. 43-47.