

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ДЕФЕКТНЫХ СТРУКТУР В КРИСТАЛЛАХ – ЭЛЕМЕНТАХ САМООРГАНИЗАЦИИ СИСТЕМЫ НА ВНЕШНЕЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

Старостенков М. Д.¹⁾, Безносюк С. А.²⁾, Старостенков Д. М.²⁾, Демкина И. А.³⁾

¹⁾ *Алтайский государственный технический университет, Барнаул, Россия,*
genphys@agtu.secna.ru

²⁾ *Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия,*
Dmitry.Starostenkov@enterra-inc.com

³⁾ *Восточно-Казахстанский государственный технический университет, Усть-Каменогорск, Казахстан,*
daltek@ukg.kz

В настоящей работе представлены результаты компьютерного моделирования структурно-энергетических превращений, имеющих место на микроскопическом, атомном уровне в первоначально идеальном кристалле ГЦК решетки, подвергнутом деформации и термоактивации. При исследовании самоорганизации кристалла под действием деформирующего напряжения растяжения применялась квазитрехмерная модель ГЦК решетки кристалла твердого Ar. Взаимодействие между атомами представлялось потенциалом Ленарда-Джонса с учетом связей атомов в девяти координационных сферах. После приложения к кристаллу определенных значений деформирующих напряжений следовала релаксация структуры до достижения определенного минимума потенциальной энергии при температурах, близких к 0 К. Для реализации процесса релаксации случайно задавался локальный разогрев до температур ~5 К. Компьютерный эксперимент показал, что, в зависимости от величины деформирующих напряжений элементами самоорганизации системы на этапах «пластическая деформация – разрушение», кристалл претерпевает пять стадий структурных перестроек [1]: 1) стадия инициирования дислокаций и их движения в различных системах скольжения; 2) формирование микропор различных размеров в различных позициях; 3) образование микротрещин в результате объединения микропор; 4) стадия роста микротрещин в результате объединения микропор; 5) стадия полного разрушения за счет объединения микропор. Каждая стадия сопровождается бифуркацией внутренней энергии кристалла. Подобные результаты были получены методом молекулярной динамики при исследовании импульсного разогрева двумерного кристалла сплава Cu_2Au . В этом случае элементами самоорганизации структуры служили точечные дефекты и механизмы диффузии – обменный, кольцевой, краудионный [2].

Список литературы

1. Starostenkov M.D., Ovcharov A.A. Crystal Argon Stability under Stretching Stress / Computational Materials Science, 14 (1999), pp. 215-219.
2. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Пацева Ю.В. Исследование механизма самодиффузии в двумерных металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2004, № 1, с. 147-151.