

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОАКТИВИРУЕМОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ДВУМЕРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ

Старостенков М. Д.¹⁾, Попова Г. В.²⁾, Скаков М. К.²⁾

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

²⁾ *Восточно-Казахстанский государственный университет,
Усть-Каменогорск, Казахстан,
daltek@uke.kz*

В настоящее время наноструктурным материалам уделяется все более возрастающее внимание в научных исследованиях. Такие системы являются важными в современных наукоемких технологиях, вследствие возможностей обнаружения новых свойств, которые могут быть применены на практике создания материалов с определенным перечнем интеллигентных свойств.

В представляемой работе представлены результаты исследований, выполненных по методу молекулярной динамики термоактивируемой стабильности двумерных металлических композитов, состоящих из слоев интерметаллида Ni_3Al , чистых металлов Al или Ni.

Упаковка двумерных нанокристаллов представлялась плоскостью $\{111\}$ ГЦК решетки или сверхструктуры $L1_2$. Взаимодействия между различными парами атомов задавались наборами полуэмпирических потенциалов Морза. Расчетный блок композиционного материала представлялся определенными конфигурациями интерметаллида Ni_3Al , прослойки чистых Al или Ni. За пределами расчетного блока, содержащего до 10^5 атомов, система повторялась с помощью периодических граничных условий. Прежде всего в компьютерном эксперименте задавалась определенная структурная конфигурация композита. Затем, в течение 10 пс компьютерного времени выполнялся разогрев системы до температуры порядка 50К с последующей динамической релаксацией системы по всевозможным смещениям атомов с использованием системы обыкновенных уравнений динамики Ньютона. После чего следовал этап быстрого охлаждения двумерного кристалла до 0 К. Затем выполнялся компьютерный эксперимент посредством импульсного разогрева композита до определенной температуры. Компьютерный эксперимент показал, что в зависимости от структуры и формы фаз Ni_3Al , Ni и Al, входящих в состав композита, меняется как температура начала процессов термоактивируемой перестройки межфазных границ, так и диффузионные механизмы, вызывающие подобную перестройку.