

Министерство образования и науки Российской Федерации
Научный Совет РАН по физике конденсированных сред
Научный Совет Президиума РАН по материалам и наноматериалам
Межгосударственный координационный совет по физике прочности
и пластичности материалов
Институт физики твердого тела РАН
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
Севастопольский государственный университет

Конференция проводится при финансовой поддержке Российского
Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 16-02-20195)

LVII Международная конференция «Актуальные проблемы прочности»

*24–27 мая 2016 года
Севастополь, Россия*



СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Севастополь
2016

УДК 539.4 (06)
ББК 22.25я43
А 43

«Актуальные проблемы прочности», Международная конференция (LVII; 2016;
Севастополь)

Актуальные проблемы прочности: сборник тезисов LVII международной конференции,
24-27 мая, 2016 г. / СевГУ. – Севастополь, 2016. – 294 с.

Тезисы публикуются в авторской редакции

ISBN 978-5-9907602-7-1

© СевГУ 2016
© МИСиС 2016

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВИЖУЩЕГОСЯ ДИСКРЕТНОГО БРИЗЕРА С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ В КРИСТАЛЛЕ СОСТАВА A_3B

Захаров П.В.¹, Ерёмин А.М.¹, Старостенков М.Д.²

¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет
им. В.М.Шукина, Бийск, Россия

²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
Барнаул, Россия
zakharovpv1@rambler.ru

В последнее время значительное внимание уделяется изучению нелинейного объекта – дискретного бризера (ДБ), который представляет собой локализованное в пространстве незатухающее колебание большой амплитуды в бездефектной нелинейной дискретной системе [1]. В реальных моделях кристаллов следует говорить о квазibriзерах, имеющих конечное время жизни и нестрогую периодичность колебаний во времени [2]. Предполагается, что ДБ учувствуют в различных процессах твёрдых тел. В частности, ДБ могут повышать каталитические свойства наночастиц с неупорядоченной структурой, приводить к радиационно-стимулированному росту пор в металлах, вносить вклад в диффузию, транспортировать электрический заряд, приводить к отжигу дефектов, снижать энергетический барьер химических реакций в кристаллических твёрдых телах и т.д.

Целью настоящей работы является изучение взаимодействия движущегося ДБ с точечными дефектами в кристалле состава A_3B на примере Pt_3Al . Рассматриваемая модель представляла собой объёмный кристалл Pt_3Al со сверхструктурой $L1_2$ на основе ГЦК-решетки (Рис. 1), размером $225,71 \times 29,32 \times 20,73 \text{ \AA}^3$, содержащей 8640 атомов [3]. В качестве точечных дефектов выступали вакансии атома Pt, вакансии атома Al и межузельный атом Al, внедрённый в тетраэдрическую пустоту. Атомы взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе.

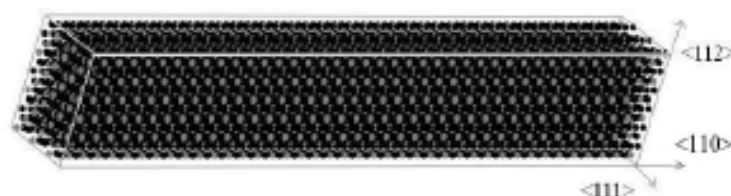


Рис. 1. Вид объёмной модели расчетной ячейки кристалла Pt_3Al с указанием кристаллографических направлений, черным цветом обозначены атомы Pt, серым – Al.

Для возбуждения движущегося ДБ отклонялись из положения равновесия два атома Al вдоль направления $\langle 110 \rangle$, после чего происходил процесс релаксации, в результате которого формировался подвижный дискретный бризер с жестким типом нелинейности. Полученные данные позволяют судить о влиянии движущегося дискретного бризера на точечные дефекты в кристаллах в зависимости от его скорости, энергии и удаленности от дефекта.

1. A.J. Sievers, S. Takeno, Phys. Rev. Lett., 61, 970 (1988).
2. G.M. Chechin, G.S. Dzhalanova, E.A. Meshonzhina, Phys. Rev. E, 74, 036608 (2006).
3. P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, S.V. Dmitriev, N.N. Medvedev, A.M. Eremin, JETP, 121 (2), 217 (2015).