

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОДВИЖНЫХ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ С АГРЕГАТАМИ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛЕ СТЕХИОМЕТРИИ A_3B

Захаров П.В.^{1,2}, Ерёмин А.М.¹, Старостенков М.Д.²,
Чередниченко А.И.¹

¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический
университет, г. Бийск, asisstentz@mail.ru

²Алтайский государственный технический университет, г. Барнаул

Возможность существования нелинейных локализованных колебательных мод или дискретных бризеров (ДБ) была доказана строго математически и получено множество результатов численными методами [1]. ДБ были изучены экспериментально в различных областях физики путем прямых и косвенных наблюдений. В кристаллах прямое наблюдение ДБ проблематично, т.к. они не являются топологическими дефектами, при этом имеют размер порядка нескольких межатомных расстояний и время жизни до нескольких наносекунд. Однако, такие объекты, как ДБ могут оказывать влияние на топологические дефекты в кристаллах [2]. В данной работе методом молекулярной динамики исследуется влияние подвижных дискретных бризеров в кристалле состава A_3B на агрегаты точечных дефектов. Также изучается взаимодействие подвижных ДБ между собой при их движении в одном направлении с разными скоростями. Рассматривается возможность существования мультисолитона из нескольких дискретных бризеров и его взаимодействие с дефектами в кристалле. Выбор сплава для исследования обусловлен рядом факторов. Во-первых, сплавы стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$ являются многочисленными, поиск известных в настоящее время систем, обладающих $L1_2$ структурой, позволил выявить порядка 190 таких фаз в области состава A_3B . Во-вторых, сплавы с данной структурой являются наиболее часто модельными и выбираются для фундаментальных исследований с целью разработки структурно-физических основ создания новых конструкционных и функциональных материалов с различными уникальными свойствами. В-третьих, сплавы с $L1_2$ структурой являются основой разработки существующих в настоящее время суперсплавов. Возможность существования двух типов дискретных бризеров в стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$ показана в работах [3, 4-9].

Ерёмин А.М. благодарит за финансовую поддержку РФФИ, проект № 16-42-220002 p_a.

Захаров П.В. благодарит за финансовую поддержку РФФИ, проект №16-12-10175, проект №166 программы Министерства образования и науки РФ.

Список литературы

- [1] Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals // Phys. Rev. Lett. 1988. V.61. No.8. P. 970-973.

- [2] Кистанов А.А., Дмитриев С.В., Семенов А.С., Дубинко В.И., Терентьев Д.А. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров с вакансией в двумерном кристалле // Письма в ЖТФ. 2014. т.40. в.15. С. 58-65.
- [3] Zakharov P.V., Dmitriev S.V., Starostenkov M.D. Dynamics of Discrete Breathers in the Pt₃Al Crystal // Key Engineering Materials. 2016. V.685. P. 65-69.
- [4] Захаров П.В., Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М. Моделирование взаимодействия дискретных бризеров различного типа в нановолокне кристалла Pt₃Al // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. т.148. №2. С. 252-257.
- [5] Безносюк С.А., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. Теоретические основы компьютерного наноинжиниринга биомиметических наносистем : монография / М. С. Жуковский [и др.] ; Алтайский гос. ун-т [и др.]. Томск, 2011. 236 с.
- [6] Полетаев Г.М., Дмитриенко Д.В., Дябденков В.В., Микрюков В.Р., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование диффузионной проницаемости тройных стыков границ наклона и границ смешанного типа в никеле // Физика твердого тела. 2013. т.55. №9. С. 1804-1808.
- [7] Санников А.В., Полетаев Г.М., Сосков А.А., Старостенков М.Д. Взаимодействие точечных дефектов с когерентными межфазными границами Ni-Al (100) и (111) // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. т.11. №3. С. 317-321.
- [8] Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В. Антисимметричный дискретный бризер в кристалле Pt₃Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. т.11. №3. С. 388-392.
- [9] Старостенков М.Д. Кристаллогеометрическое описание планарных дефектов в сверхструктурах: автореф. ... д-ра физ.-мат. наук. Барнаул, 1994. 85 с.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ В СПЛАВЕ Fe-Cr

Корчуганов А.В., Зольников К.П., Крыжевич Д.С.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск,
avkor@ispms.ru*

На основе метода молекулярной динамики было проведено изучение особенностей зарождения и развития первичных радиационных повреждений при генерации каскадов атомных смещений в сплаве железо-хром. Межатомное взаимодействие описывалось в рамках приближения Фин-