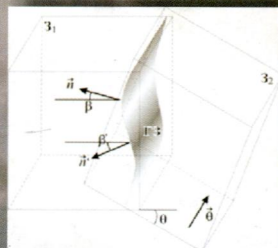
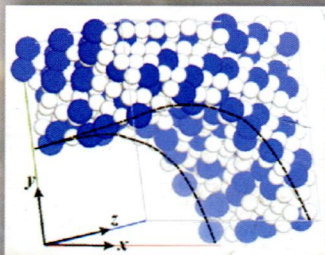


Г.М. Полетаев, А.Б. Юрьев, В.Е. Громов,
М.Д. Старостенков

АТОМНЫЕ МЕХАНИЗМЫ СТРУКТУРНО-
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ
ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ГЦК
МЕТАЛЛАХ И ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ Ni_3Al



Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное агентство по образованию
ГОУ ВПО “Алтайский государственный технический университет”
ГОУ ВПО “Сибирский государственный индустриальный университет”
ООО «Евразхолдинг»
ОАО «Новокузнецкий металлургический комбинат»

Г.М. Полетаев, А.Б. Юрьев, В.Е. Громов, М.Д. Старостенков

АТОМНЫЕ МЕХАНИЗМЫ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ
ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ГЦК
МЕТАЛЛАХ И ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ Ni_3Al

УДК 538.913
ББК 22.37
А 926

АТОМНЫЕ МЕХАНИЗМЫ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ГЦК МЕТАЛЛАХ И ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ Ni_3Al / Г.М. Полетаев, А.Б. Юрьев, В.Е. Громов, М.Д. Старостенков. – Новокузнецк: Изд-во СибГИУ, 2008. – 160с.

В монографии приводятся результаты по исследованию механизмов структурно-энергетических превращений, имеющих место вблизи границ зерен наклона в ряде металлов с ГЦК решеткой и интерметаллиде Ni_3Al . Исследования выполнены с использованием метода молекулярной динамики. Выявлен вклад трех основных механизмов – миграции атомов вдоль ядер зернограничных дислокаций, циклического механизма перемещения цепочек атомов между ступеньками зернограничных дислокаций, механизма миграции атомов между соседними рядами дислокаций в процесс структурно-энергетических изменений в материале, в том числе нарушение ближнего порядка как в объеме бикристалла, так и вблизи ГЗ. Впервые проведены исследования перераспределения свободного объема вводимого внесением в расчетный блок определенной концентрации вакансий или межузельных атомов на процессы миграции атомов в сплаве вблизи ГЗ. Впервые проведены исследования на атомном уровне особенностей протекания деформации сжатия и растяжения вблизи ГЗ наклона, выделены две стадии течения пластической деформации и их основные механизмы.

Книга предназначена для научных и инженерно-технических работников исследовательских и научных институтов, заводских лабораторий, специализирующихся в областях физики конденсированного состояния, материаловедения и нанотехнологий и может быть полезна преподавателям, аспирантам и студентам вузов соответствующих специальностей.

Табл. 13, ил. 100, библ. 256 наим.

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, профессор С.А. Безносюк
доктор физико-математических наук, профессор А.И. Потекаев

Утверждено к печати Учеными советами
ГОУ ВПО “Сибирский государственный индустриальный университет” и
ГОУ ВПО “Алтайский государственный технический университет”

Без объявления

© Г.М. Полетаев, А.Б. Юрьев, В.Е. Громов, М.Д. Старостенков,

© ГОУ ВПО “Сибирский государственный индустриальный университет”, 2008 год

© ГОУ ВПО “Алтайский государственный технический университет”, 2008 год

© ОАО “Новокузнецкий металлургический комбинат”, 2008 год

СОДЕРЖАНИЕ

I. Обзор современных представлений о структуре и свойствах границ зерен в металлах и сплавах	7
1.1. Границы зерен, их классификация и характеристики	7
1.2. Модели структуры границ зерен	9
1.3. Энергия границ зерен	15
1.4. Теоретические представления о диффузии по границам зерен	17
1.5. Динамика структуры вблизи границ зерен в условиях деформации	24
II. Описание основных элементов компьютерного эксперимента	28
2.1. Методы компьютерного моделирования в задачах материаловедения	28
2.1.1. Стохастический и статический методы	29
2.1.2. Метод молекулярной динамики	30
2.1.3. Основные проблемы компьютерного моделирования	35
2.2. Потенциал межатомного взаимодействия	38
2.2.1. Представление межатомных взаимодействий в сплаве	38
2.2.2. Построение потенциалов межатомного взаимодействия	40
2.3. Модель границы зерен наклона	45
2.4. Основные визуализаторы и параметры, используемые в модели	47
III. Атомная структура границ зерен наклона в ГЦК металлах и интерметаллиде Ni₃Al	52
3.1. Распределение напряжений в области границ зерен	52
3.1.1. Распределение напряжений вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах	52
3.1.2. Распределение напряжений вблизи границ зерен наклона в Ni ₃ Al	63
3.2. Энергия границ зерен наклона в зависимости от угла разориентации	67
IV. Диффузия вблизи границ зерен наклона	72
4.1. Механизмы диффузии по границам зерен наклона	72
4.1.1. Исследование механизмов диффузии по границам зерен наклона <111>	72
4.1.2. Исследование механизмов диффузии по границам зерен наклона <100>	77
4.2. Зависимости коэффициента диффузии по границам наклона от температуры и угла разориентации зерен	82
4.2.1. Интенсивность диффузии по границам зерен наклона в ГЦК металлах	82
4.2.2. Интенсивность диффузии по границам зерен наклона в Ni ₃ Al	90
4.3. Диффузия вблизи границ зерен наклона в Ni ₃ Al при наличии высокой концентрации точечных дефектов	94
4.3.1. Влияние вакансий на диффузию вблизи границ зерен наклона в интерметаллиде Ni ₃ Al	95
4.3.2. Влияние межузельных атомов на диффузию вблизи границ зерен наклона в интерметаллиде Ni ₃ Al	102
V. Динамика атомной структуры вблизи границ зерен наклона при деформации	109
5.1. Структурно-энергетические превращения вблизи границ зерен наклона при деформации	109
5.2. Интенсивность диффузии вблизи границ зерен наклона в условиях деформации	119
5.2.1. Коэффициент зернограницной диффузии в ГЦК металлах в зависимости от деформации	119
5.2.2. Коэффициент зернограницной диффузии в Ni ₃ Al в зависимости от деформации	125
Заключение	132
Список литературы	134