

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ В ЦГК ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Пахомова И.Н.

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина,
Физический ф-т, каф. Физики кристаллов,
Украина, 61077, г. Харьков, пл. Свободы 4,
matskin@univer.kharkov.ua

Методом молекулярной динамики промоделированы некоторые процессы, происходящие в дислокационной подсистеме, которые являются ответственными за упрочнение и возврат в ЦГК. С учетом переползания дислокаций получено построение малоугловых дислокационных границ различных конфигураций; развал дислокационных границ, содержащих различные асимметричные участки; прорыв дислокационным ансамблем симметричной малоугловой дислокационной границы.

В кристалле существует тот или иной ансамбль краевых дислокаций, который в процессе высокотемпературного отжига под действием внутренних напряжений преобразуется в конфигурации с меньшей внутренней энергией. В виду того что для параллельных винтовых дислокаций не существует положений равновесия, они в рассмотрении не присутствуют. Такая модель может быть использована, когда радиус кривизны дислокационной линии существенно превышает среднее расстояние между дислокациями. Тогда дислокации можно считать в основном прямолинейными, а полный дислокационный ансамбль при исследовании его эволюции можно разбить на подансамбли, каждый из которых также является системой параллельных дислокационных линий.

Данные компьютерного моделирования позволяют, во-первых, наблюдать в динамике эволюцию дислокационной подсистемы с учетом переползания, во вторых, отслеживать возможные устойчивые конфигурации дислокационных ансамблей, что может давать представления о возможных дислокационных реакциях, в третьих, сопоставляя конфигурации дислокационных ансамблей, наблюдаемые экспериментально (методом избирательного травления) с полученными моделированием, можно определить направление вектора Бюргерса у дислокаций, расположенных в устойчивых положениях.