ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/123

**ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНЫХ ПЕРЕСТРОЕК ПРИ ЗАРОЖДЕНИИ
ПЛАСТИЧНОСТИ В ОЦК МЕТАЛЛАХ С ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРОЙ**

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

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

На основе метода молекулярной динамики исследованы последовательности структурных перестроек, приводящих к формированию и распространению дефектов структуры в ОЦК металлах при различных схемах механического нагружения. Проведена количественная оценка и анализ изменения избыточного атомного объема в локальных областях нагружаемых кристаллитов и изучена его роль в генерации дефектной структуры. Моделируемые кристаллиты имели форму параллелепипеда. Их температура составляла 300 К. Нагружение кристаллитов проводилось по двум схемам: одноосное растяжение и деформирование с сохранением объема (растяжение вдоль одного направления и сжатие вдоль двух других).

Показано, что при достижении предела упругости в образцах зарождаются двойники. Механизмы их формирования и движения существенно отличаются для рассмотренных схем нагружения. При растяжении с сохранением объема двойник формируется посредством зарождения и движения двойникующих дислокаций. В случае одноосного растяжения образца со свободной поверхностью на фронте движения двойника происходят локальные структурные трансформации, соответствующие ОЦК–ГЦК–ОЦК перестройке кристаллической решетки. Данные трансформации сопровождаются изменением атомного объема на величину около 20%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 17-19-01374).