



ЭВОЛЮЦИЯ ДЕФЕКТНЫХ СТРУКТУР В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ



Старостенков Михаил Дмитриевич

Заведующий кафедрой физики,

доктор физико-математических наук, профессор

E-mail: genphys@mail.ru

Телефон: 8 (3852) 29-08-52

Разработана классификация и теория планарных дефектов – антифазных границ, дефектов упаковки и их комплексов для большого набора сверхструктур с различной кристаллогеометрией. Методами компьютерного моделирования исследованы их структурно-энергетические характеристики и их влияние на свойства конкретных сплавов.

Показана роль перераспределения свободного объема в структурно-энергетических превращениях, имеющих место вблизи межфазных границ и границ зерен. Исследованы механизмы миграции атомов в зависимости от типа межфазных границ, температуры и давления.

Методом молекулярной динамики рассчитаны: структурно-энергетические характеристики примеси водорода в решеточной вакансии в ГЦК металлах Pd и Ni; энергия активации самодиффузии по симметричным границам зерен наклонна в интерметаллидах Ni₃Al в зависимости от температуры и угла разориентации.