**Туркебаев, Толеу Эдыгенович.**

## Изучение на атомарном уровне реакций взаимодействия точечных дефектов с ядром краевой дислокации : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Алма-Ата, 1985. - 172 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Туркебаев, Толеу Эдыгенович

В В Е Д Е Н И Е.

Глава I. РЕАКЦИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ С ДИСЛОКАЦИЯМИ И ИХ РОЛЬ В ПРОЦЕССАХ РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРО-ВАННОЙ ДЕФОРМАЦИИ (ОБЗОР).

1.1. Явления радиационно-стимулированной ползучести и распухания (общая характеристика).

1.2. Теоретические модели радиационно-стимулированной деформации.

1.3. Основная, модель радиационно-стимулированной деформации (модель теории скоростей).

1.3.1. Радиационное распухание (континуальное рассмотрение).

1.3.2. Радиационная ползучесть.

1.4. Изучение взаимодействия точечных дефектов с краевыми дислокациями методами машинного моделирования.

1.5. Выводы и постановка задачи.

Глава 2. МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ.

2.1. Общая схема метода молекулярной динамики для расчета взаимодействия точечных дефектов с дислокацией.

2.2. Процедура вычислений.

2.3. Построение начальных конфигураций атомов кристаллита при изучении реакций взаимодействия! дислокации с точечными дефектами.

2.3\*1. Построение кристаллита, содержащего точечный дефект.

2.3.2. Построение кристаллита, содержащего дислокацию.

2.3.3. Способы формирования точечного дефекта в окрестности ядра дислокации.

2.4. Расчет энергий связи дислокации с точечными дефектами и определение зон спонтанного захвата точечных дефектов.

2.5. Описание пакета подпрограмм "ACTION".

2.6. Тестовые расчеты.

Глава 3. РЕАКЦИИ ВЗШЮДЕЙСТВШ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ С ЯДРОМ

КРАЕВОЙ, ДИСЛОКАЦИИ В НЕНАГРУЖЕННЫГ КРИСТАЛЛАХ. .'

3.1. Расчет энергии связи комплекса дислокация-точечный дефект и зон спонтанного захвата точечных дефектов дислокацией.

3.1.1. Взаимодействие дислокации с межузельной "гантелью" р:Г0]

3.1.2. Взаимодействие дислокации с вакансией.

3.2. Механизмы захвата точечных дефектов дислокацией.

3.3.- Влияние ориентировки межузельных атомов на их.реак ции взаимодействия с краевой дислокацией.

3.4. Влияние конфигурации межузельных атомов на их реакции взаимодействия, с дислокацией, атомные перестройки межузельных атомов вне зоны спонтанного захвата

3.5. Использование результатов машинного моделирования преимущественного захвата межузельных атомов при вычислении скорости распухания.

Глава 4. РЕАКЦИИ ВЗШЮДЕЙСТВШ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ С ЯДРОМ

КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ В НАГРУЖЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ.'.

4.1. Введение одноосных напряжений в расчетную модель.

4.2. Влияние ориентировки внешнего напряжения на взаимодействие точечных дефектов с краевой дислокацией.

4.3. Влияние уровня напряжения на взаимодействие точечных дефектов с краевой дислокацией.

4.4. Использование результатов машинного моделирования при вычислении скорости радиационной ползучести.