**Овчаров, Андрей Александрович.**

## Моделирование структурной перестройки ГЦК кристалла при деформации : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Барнаул, 1998. - 186 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Овчаров, Андрей Александрович

В;, а ттатттхд А V пп V.-т

Л I ! ! ' Л ! \ Д < • к'<111 г < Г'\ 1 ^ ' > I I / » > /. .'< 11> > \* 1 I г( \* 1 '1 <"1 I I • I . ■ у . ЛЛЛП1Л#ГТТТГ£Г >1'|1 у и| ;><>><<> ОЛЛТТП х лгшл ± . хух«^Дч/ЛырОг>аМИи Дк/Ширмириоаппи] и ^и^хилхххал юсрдш и 1иш.

Изучение пластической деформаций материалов и динамические

ДйСЛОКсЩИОлШьхС ПрОцСС^Ь! В КрИС 1 ЗЛлЭ-Х.

I 1 ПгиЛвиТчТР ЙЛПЙУТи V Л ГГРТТИПЛВаии а ТТТДЛТТЛТСЯТТМи Т/Г тттли я ъ\* ттхт а г\* хг л л V

X . 1 . X 1»Х XXX\УХ-»ИХХ1Х/Л ^¿ДхА^/^ ХЧЦХ^ХХГХ XX ^ ^ХХХХЦуНХХХ^УУХУХХД.

ТТГ 7Л ТТАТгПгТТТГ АТТГГ т Т V ГТЛАТТЛЛЛЛТ! П "а /Т Л ТО\*-» Т X м ТТ л V 1 О

Д1п^лилациипп01л ириц^сио г> шах^мпшхаЛ.

1 О Т/Тлг- ТТ^ ТТ А15 ортхга ЛТП\ГЬ\*Т»Г1Л ТТ ЛВЛМЛПГВ ТГТХЛ ТТЛЬ-ОТТТТГТ ТРАПЛТТТГГЛГ

1. ххЪ^лъДиицтх^ ух^ул! ур п ииипч/ . х Сч/рч/.чмл.ч/ч.'ачлмл»/ Я £1ТА ТТТТ 1 ^

АОД01.А и

1 'З >^Т/'1~»ТТ<аПТ7И ?ДТТТО ТТТ ТТ/~»а ПО» ГТТ£>ТТТТа ТТТТАТТАТГПТТТТАТТТТТ XV гглАТТЛГ-ЛАТ1 п

1 сишпич/ но^Ч^пн^ д^лилацпиппоАл приц^^ио х> т» яот^тлт^о тто V О Л та^рианал.¿,-г

1.4. Модели описания межатомных взаимодействий в материалах.

I ^ I ъяттягпа т/гглттртг.лийиътй

1. «ъ/ > Х ¿V/ V Х/Х\Ы, ч^мДм. XXX XXV ХУ,Ц\У Х>иХ11Х/1. .«/

Г ТТ А 13 А О I I ЛАТ-ГЧАЛТТТТ/З л А ТТЛ ТТТГ Тг¡"^ТГАТ'О ГТ7ТО Т> ОЛ 7ТОГТО\7 Т» ^Л ГГЛТЛ ГтТПТТАТ! Л'ТОТ'ТТТ/'П

А лАиА ххииАм^ч/ПпС мидит хурнС'Юллл о оада^гал тил^л)ллрпип Vллайллп.

О 1 Л ттАттттАвориа ттл\'Аггттлтт Атптгхлгт7т.т хлпттлтогто

Х^.Х. ПУАиДИ^Й ^

2.2. Процедура расслоения кристалла на одномерные упаковки.

9 л ТТРПРУЛГ! ¡ЛТ м^-л'^тлг.галго тг'гакА.'Л ТТАЙ."ТВИО V платил ¡трйлтантл лгАчетпг —' . I 1VI, V/Л ^/.«А.и.Х/Х V/ I 1 :Ч г I I иIIЛ XV IV Л14 Г I ! \* 1 ^ I > V» 1 ( IIV/ пттттЛв^аптттт» ^ггтот/'лт^п!еи от^га-лп А А идпии^ргшхиш ^иаливдаиш а1иших>.-т-г

2.4. Реализация внутренних взаимодействий в кристалле и внешних воздействий на него.

О ^ /1/ . ,I/ % • 1 ii.ti.i->- 11 1 1»/ 1 ттиЛчат^лп СП

Дч/фчл\.х\л>.

2.6. Моделирование процесса релаксации кристалла.

2.7. Постановка вычислительного эксперимента.

ГЛАВА 3. Методики получения численных параметров.

3.1. Методика расчета локальной плотности потенциальной энергии кристалла.

3.2. Методика расчета локальной плотности сил.

3.3. Функция распределения смещений атомов.

3.4. Функция радиального распределения атомов. атомным цепочкам, сил взаимодействия между ними и смещении атомных цепочек из решеточных положений.

3.6. Временные и деформационные зависимости основных характеристик кристалла.

3.7. Методика визуализации полученных численных характеристик.

ГЛАВА 4. Результаты.

4.1. Моделирование процесса импульсной деформации.

4.1.1. Сжатие.

4.1.1Л. Классификация по конфигурации атомных смещений./

4.1.1.2. Классификация состояний кристалла по графику

TTATPUTTMO Т71. UA W ОиРПТ 1Ш 1 VllU,XlCUIlDliUJri ^livpl

4.1.1.3. Классификация состояний кристалла по графику uvpuxij

ЛИ ^£5ТТТаТГТГТГ Q

VlViWlijVnil\*! .-.

Л 1 Т Л Т2ттт>/~»тттт -т. l.l.T. 1JD1DU/(D1.

4 .1.2. Растяжение.

4.1.2.1. Выводы.

Л 1 1 Гтт-.тжт^ T.I.J. ч^дош

1 1 Q

4.1.3.1. Классификация по графику энергии.

4.1.3.2. Классификация по графику смещений.

1! "2 "3 ] -Т.Х.->ишпидо!.У~>->

ГЧт,.

Т.Х.-Т. VADil I I VflVOI

Л Л Л Ргготт^ -Х~ S Чтлп.тчга I — ■ — - —. ■ zivcn-hx-.х

1 "2 Л

4.1.4.1. Классификация по графику энергии.

4.1.4.2. Классификация по графику смещений.

Л Л А "5 ИГГГ.А „Т, 1 Л О ОЫВОДЫ.1т"

4.2. Изучение процесса релаксации кристалла с изъятым атомным

ТГТХЛТЛЛ^А ГТЛТТ Т>ЛО TTÖTl^TOTiöTli TT £1 гК rinAfOTITJ ТД OTTOTT

Дг^лчли нид uvo^vnv luiivivi ^vvpvjJiviuij,im ч/Ди-п

4.2.1.13ыйиДш