**АННОТАЦИЯ**

Тема: «Построение парного силового потенциала взаимодействия для моделирования структурного перехода ГЦК-ОЦК»

Автор: Мущак Н.Д.

Научный руководитель: Подольская Е.А.

В настоящее время приобретают актуальность задачи, связанные с расчетами прочностных характеристик объектов, которые могут,в силу некоторых допущений, обладать бездефектной кристаллической структурой. Прочностные характеристики объектов тесно связаны с устойчивостью структуры материала. Внутренняя структура тел

при потере устойчивости может претерпевать изменения. Процесс изменения внутренней упорядоченности может являться структурным переходом и зачастую связан с потерей устойчивости, потому что невозможно перейти из одной структуры в другую без перестроения кристаллической решетки.

Изучение процессов потери устойчивости и структурных переходов очень важно в современной механике в силу необходимости оптимизации конструкций, так как многие инженерные задачи связаны с прочностными расчетами. Актуальны расчеты, по проектированию сооружений и приборов, выполненных из металлов или сплавов. Под нагрузкой или под действием температуры в металлах могут происходить структурные переходы; поскольку меняется кристаллическая структура, у материала меняются механические свойства. Примером может служить мартенситный переход в материалах с эффектом памяти формы, которые приобретают широкое применение в приборостроении и медицине. Мартенситный переход происходит под действием температуры, при этом аустенит, который, например, для y-железа имеет гранецентрированную кубическую кристаллическую решетку (ГЦК) переходит в мартенсит, который, например, для a-железа имеет объёмноцентрированную кубическую решетку (ОЦК).

Целью данной работы является описание структурного перехода ГЦК-ОЦК, для чего разработан парный силовой потенциал особого вида, аналогично предложенному в [10] для описания нано-фазы алмаза. Такое задание потенциала обеспечивает устойчивое ненапряжённое состояние для обеих структур, более точный подбор параметров, позволяющий моделировать широкий спектр материалов.

В ходе выполнения данной работы были получены следующие результаты:

1. Построен парный силовой потенциал для математического моделирования структурного перехода ГЦК−ОЦК. Данный закон взаимодействия можно применять для описания структурных переходов, где фигурируют неплотноупакованные структуры, при этом надо учитывать геометрию решеток. Преимуществами данного потенциала являются универсальность, возможность описания широкого спектра материалов, в силу достаточного количества параметров, а также вычислительная простота.

2. Получены области устойчивости для ОЦК, ГЦК и ромбической гранецентрированной кристаллической решетки, а также проведен их анализ. Построены кривые для одноосного сжатия и потенциальной энергии деформации вдоль линии, соединяющей ненапряженную ГЦК с ненапряженной ОЦК, анализ которых показал, что профили кривых соответствуют структурному переходу ГЦК−ОЦК. Благодаря построенному закону взаимодействия получен ярко выраженный локальный минимум потенциальной энергии деформации для неплотноупакованной ОЦК решетки.

Ключевые слова: расчет прочностных характеристик объектов, структурный переход ГЦК-ОЦК, математическое моделирование.

ANNOTATION

Theme: "Construction of pair force interaction potential for modeling the structural transition of fcc-bcc"

Author: Mushchak N.D.

Scientific adviser: Podolskaya EA

          At present, the tasks associated with calculating the strength characteristics of objects that can, due to certain assumptions, have a defect-free crystal structure are becoming topical. Strength characteristics of objects are closely related to the stability of the structure of the material. Internal structure of bodies at loss of stability can undergo changes. The process of changing internal ordering can be a structural transition and is often associated with a loss of stability, because it is impossible to go from one structure to another without rebuilding the crystal lattice.

       The study of the processes of loss of stability and structural transitions is very important in modern mechanics because of the need to optimize the design, since many engineering problems are related to strength calculations. Relevant calculations for the design of structures and instruments made of metals or alloys. Under the load or under the influence of temperature in metals, structural transitions may occur; since the crystal structure changes, the material changes mechanical properties. An example is the martensitic transition in materials with shape memory effect, which are widely used in instrumentation and medicine. The martensitic transition occurs under the influence of temperature, while the austenite, which, for example, has a face-centered cubic crystal lattice (ccl) for y-iron, turns into martensite, which, for example, has a body-centered cubic lattice (bcc) for a-iron.

      The purpose of this paper is to describe the structural transition of fcc-bcc, for which a pairwise force potential of a special type is developed, similar to the one proposed in [10] for describing the nano-phase of a diamond. This specification of the potential provides a stable relaxed state for both structures, a more accurate selection of parameters that allows modeling a wide range of materials.

       In the course of this work, the following results were obtained:

  1. A pairwise power potential is constructed for mathematical modeling of the structural transition of fcc-bcc. This law of interaction can be used to describe structural transitions, where loose-packed structures appear, while taking into account the geometry of the lattices. The advantages of this potential are universality, the ability to describe a wide range of materials, by virtue of a sufficient number of parameters, and also the computational simplicity.

2. Areas of stability for bcc, fcc and rhombic face-centered crystal lattice are obtained, and their analysis is carried out. Curves are constructed for uniaxial compression and the potential energy of deformation along a line connecting an unstressed fcc with an unstressed bcc, the analysis of which showed that the profile of the curves correspond to the structural transition of fcc-bcc. Owing to the built-in interaction law, a pronounced local minimum of the potential deformation energy for a non-close-packed bcc lattice is obtained.

Key words: calculation of strength characteristics of objects, structural transition of fcc-bcc, mathematical modeling.