Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого

Кафедра Теоретической Механики

Разработка парного силового потенциала взаимодействия для описания структурного перехода ГЦК-ОЦК

Мущак Никита Дмитриевич

Научный руководители: к.ф.-м.н., доц. кафедры «Теоретическая механика» Е.А. Подольская,
асс. кафедры «Теоретическая механика» А.Ю. Панченко.

Актуальность темы:

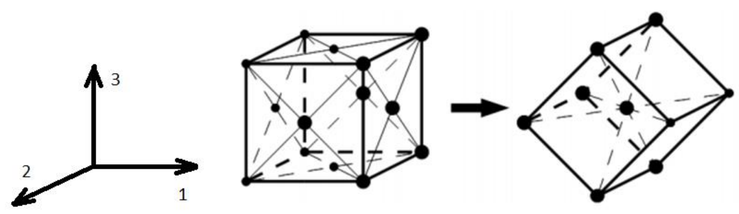
- Оценка прочностных свойств тел с бездеффектной кристаллической структурой
- Трактовка и описание данных, полученных при проведении экспериментов
- Решение задач потери устойчивости (разрушение, структурные переходы и др.)

Целью данной работы является построение парного силового потенциала для описания устойчивости равновесия ГЦК и ОЦК структур

Структурные фазовые переходы

процессы упорядоченного перемещения атомов с перестроением кристаллической решетки.

Схема Бейна: ГЦК ОЦК

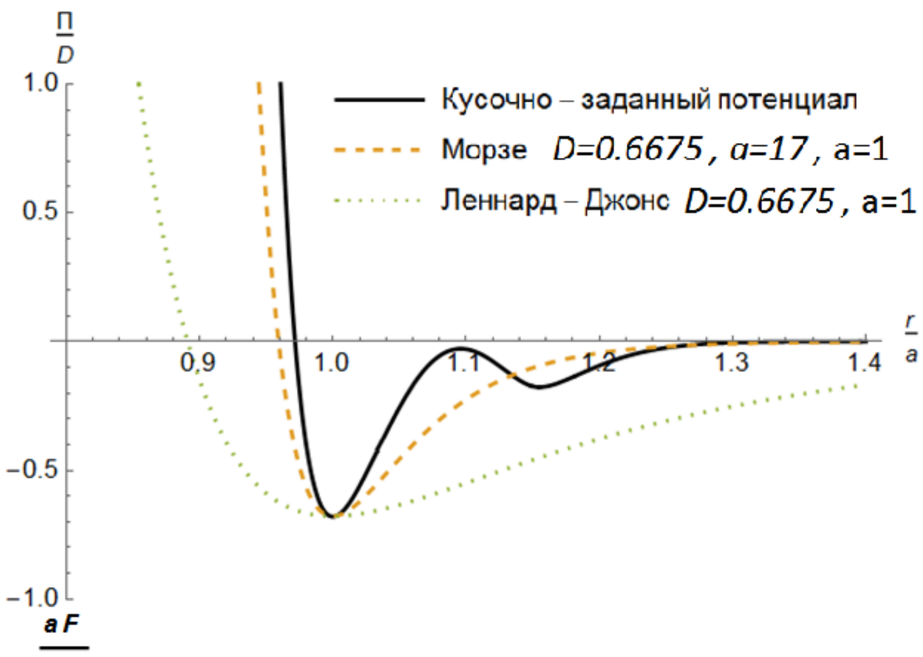


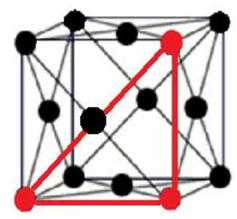
$$\varepsilon_{1,2} = \sqrt{\frac{2}{3}} - 1, \qquad \varepsilon_3 = \frac{2}{\sqrt{3}} - 1$$

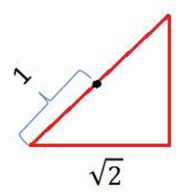
Построение потенциала взаимодействия

проводится в несколько этапов:

- строятся две силы взаимодействия на базе потенциала Морзе, при этом пересечение графика силы с осью абсцисс положим равным 1-ым и 2-ым координационным сферам ГЦК и ОЦК
- применяется сшивание двух кривых кубическим сплайном
- используется укороченное взаимодействие для пренебрежения взаимодействием до 2-ой координационной сферы ГЦК

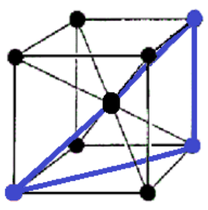


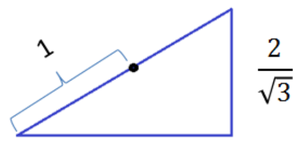




1 сфера ГЦК - 1

2 сфера ГЦК - $\sqrt{2}$





1 сфера ОЦК - 1

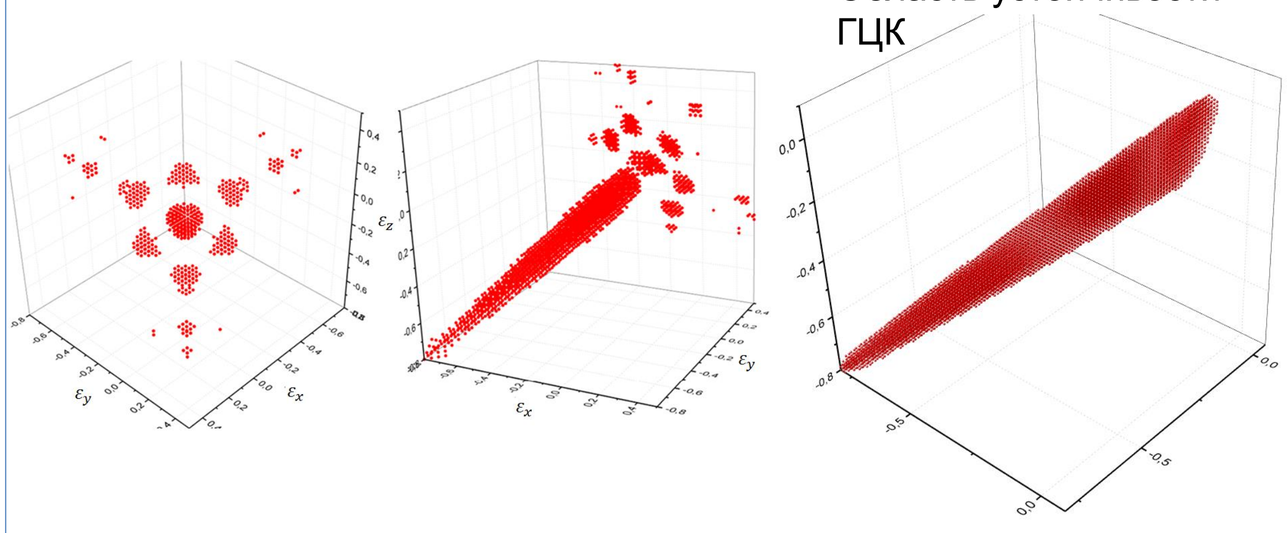
2 сфера ОЦК - $\frac{2}{\sqrt{3}}$

$$F(r) = \begin{cases} -\frac{2\alpha_1 D_1}{a_1}\left(e^{-\frac{\alpha_1(r-a_1)}{a_1}} - e^{-2\frac{\alpha_1(r-a_1)}{a_1}}\right), & r \le b_1 \\ A_1 r^3 + A_2 r^2 + A_3 r + A_4, & b_1 < r \le a_2 \\ -\frac{2\alpha_2 D_2}{a_2}\left(e^{-\frac{\alpha_2(r-a_2)}{a_2}} - e^{-2\frac{\alpha_2(r-a_2)}{a_2}}\right), & a_2 < r \le b_2 \\ -\frac{2\alpha_2 D_2}{a_2}\left(e^{-\frac{\alpha_2(r-a_2)}{a_2}} - e^{-2\frac{\alpha_2(r-a_2)}{a_2}}\right)\left(1 - \left(\frac{r^2 - b_2{}^2}{a_{cut}^2 - b_2{}^2}\right)^2\right)^2, & b_2 < r \le a_{cut} \\ 0, & r \ge a_{cut} \end{cases}$$

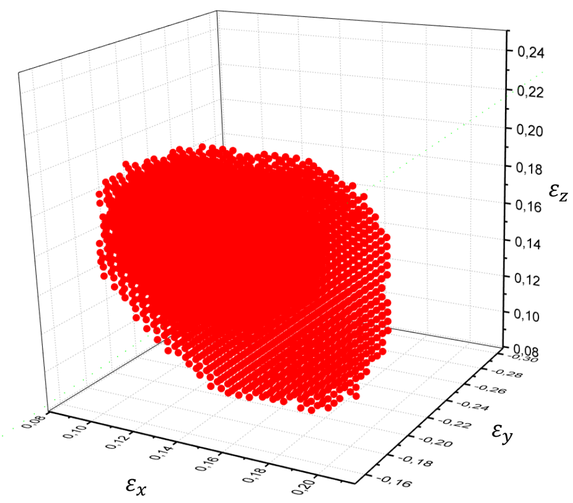
где: $\alpha_1 = 21.1$, $D_1 = 1, a_1 = 1, b_1 = 1.03$, $A_1 = 32947.2$, $A_2 = 106809.8$, $A_3 = 115194.1$, $A_4 = 41327.2$, $\alpha_2 = 26.6$, $D_2 = 0.2$, $a_2 = \frac{2}{\sqrt{3}}$, $b_2 = 1.18$, $a_{cut} = 1.41$

Области устойчивости в пространстве деформаций

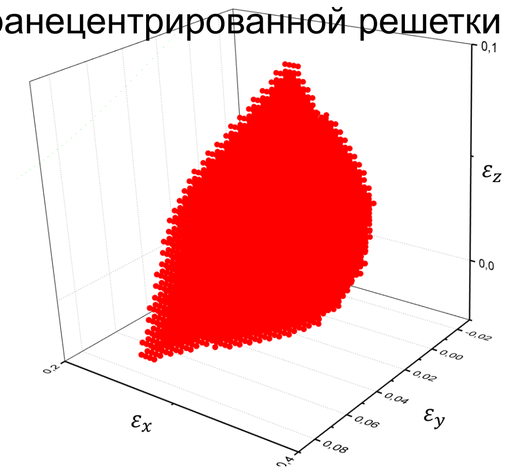
Область устойчивости ГЦК



Область устойчивости ОЦК

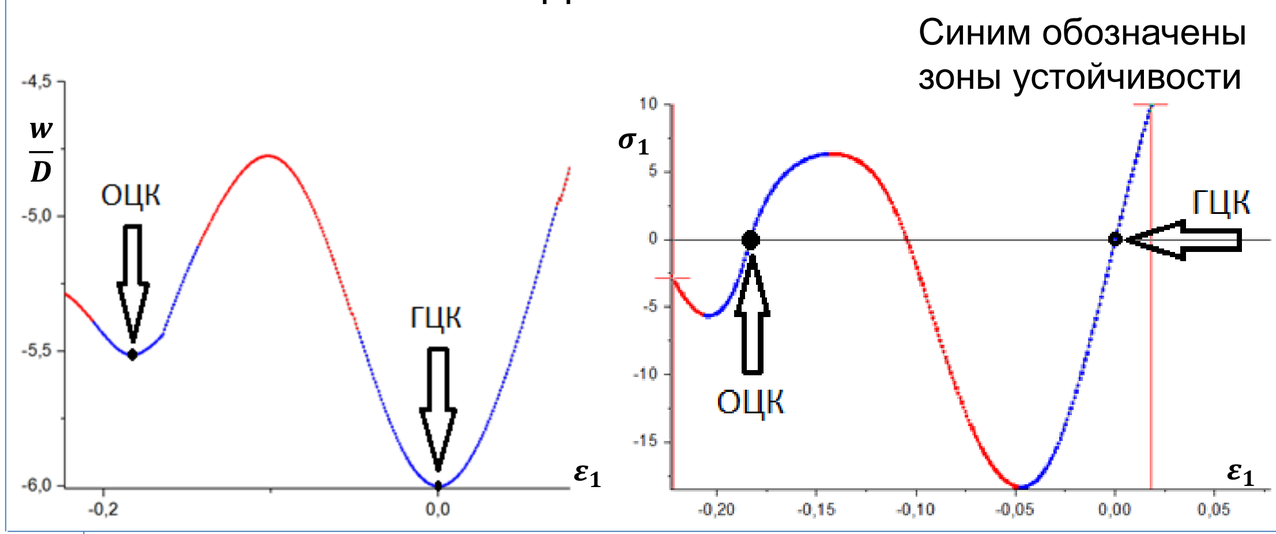


Область устойчивости ромбической гранецентрированной решетки



Профили для энергии Коши-Борна и напряжений вдоль линии одноосного сжатия

Синим обозначены зоны устойчивости



В ходе выполнения данной работы были получены следующие результаты:

- построен парный силовой потенциал для математического моделирования структурного перехода ГЦК – ОЦК. Данный закон взаимодействия можно применять для описания структурных переходов, где фигурируют неплотноупакованные структуры.
- 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. получен ярко выраженный локальный минимум потенциальной энергии деформации для неплотноупакованной ОЦК решетки.