



Contribution ID : 26

Type : **not specified**

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖАТОМНЫХ ПАРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ γ -Fe

Результаты компьютерного моделирования методом молекулярной динамики, с использованием потенциала в форме Леннарда-Джонса для расчета энергии межатомного парного взаимодействия, показывают, что вакансии вносят сжимающую деформацию в кристаллическую ячейку γ -Fe, а бивакансии – растягивающую. Наблюдаемое методом рентгеновской дифрактометрии отклонение в сторону увеличения периода кристаллической решетки твердого раствора при стремлении к нулю концентрации растворенных атомов означает, что количество бивакансий в ОЦК решетке γ -Fe может быть больше, чем вакансий.

Primary author(s) : Mrs. ФИЛИППОВА, Варвара

Presenter(s) : Mrs. ФИЛИППОВА, Варвара