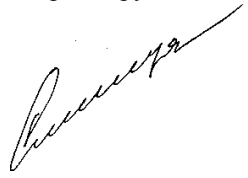


На правах рукописи



Синица Никита Викторович

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ И
РАЗРУШЕНИЯ НАНОВОЛОКОН ИНТЕРМЕТАЛЛИДА
СВЕРХСТРУКТУРЫ $L1_2 (M) Ni_3Al$**

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Барнаул – 2010

Работа выполнена в ГОУ ВПО

«Алтайский государственный технический университет
им. И.И. Ползунова»

Научный руководитель: заслуженный деятель науки РФ,
доктор физико-математических наук,
профессор, Старостенков Михаил Дмитриевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор, Безносок Сергей Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор, Старенченко Владимир
Александрович

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук
Институт проблем сверхпластичности
металлов РАН

Защита состоится « 23 » ноября 2010 г. в 12-00 час. на заседании
диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном
техническом университете по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского
государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Автореферат разослан « 22 » октября 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета, кандидат физико-математических
наук



Романенко В.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Среди групп нанообъектов в последние пять лет особое внимание уделяется металлическим нановолокнам или нанопроволокам [1-2]. Нановолокнами называют материалы, имеющие в поперечном сечении размер не более 100 нм и протяженные по длине.

В настоящее время наибольший интерес вызывают нановолокна с периодическими структурными неоднородностями наномасштаба. Это полупроводниковые системы и системы, которые включают в себя наноструктурированные металлы и сплавы [1].

Актуальным объектом исследования являются длиннопериодические металлические сплавы (ДПС) или нановолокна, содержащие длиннопериодическую структуру (ДС) [3-7]. Особый интерес с точки зрения выбора объекта исследования представляют те металлы и сплавы, у которых длинный период имеет наноразмер. От обычных упорядоченных систем с простой сверхструктурой они отличаются тем, что в сплавах этого класса упорядоченное расположение атомов периодически нарушается антифазными границами (АФГ). Учитывая, что механизмы структурно-энергетических превращений при различных режимах нагрузки, в частности одноосной деформации, позволяют объяснить аномальные прочностные свойства ДПС, ставится задача изучения механизмов структурно-энергетических превращений, происходящих в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения нановолокон интерметаллида Ni_3Al .

Объекты для исследования в настоящей работе - это нановолокна интерметаллида Ni_3Al на основе ГЦК решетки, содержащие ДС [8]. Под нановолокном, содержащим ДС, понимают протяженный монокристалл, в кристаллической решётке которого периодически внедрены АФГ в направлении деформации.

В последние пять лет в литературе отмечается рост публикаций с привлечением численных методов, посвященных изучению атомных перестроек в процессе высокоскоростной деформации (со скоростями 10^8 - 10^{10} c^{-1}) нановолокон на основе чистых металлов (Au, Ag, Ni, Al и др.) и сплавов. Однако, мало исследованными остаются свойства нановолокон интерметаллидов, содержащих ДС, в частности Ni_3Al . Интерметаллид Ni_3Al обладает положительной температурной зависимостью предела текучести. При деформации в таком сплаве может происходить сочетание структурных и сверхструктурных изменений, обуславливающих различные эффекты.

Таким образом, представленное исследование, с привлечением метода молекулярной динамики, структурно-энергетических превращений в нановолокнах ГЦК интерметаллида Ni_3Al , содержащих ДС, в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения является актуальным.

Цель работы заключается в исследовании методами компьютерного моделирования на атомном уровне процессов структурно-энергетических

превращений в нановолокнах с внедренными длиннопериодическими планарными дефектами, такими как АФГ сдвигового (САФГ) и термического (ТАФГ) типов, подвергнутых высокоскоростной динамической деформации одноосного растяжения.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что методом молекулярной динамики на атомном уровне исследованы процессы структурно-энергетических превращений, происходящие в нановолокнах Ni_3Al с внедренными длиннопериодическими планарными дефектами, такими как САФГ и ТАФГ, в процессе высокоскоростной деформации растяжения при различных температурах.

Исследованы механизмы, реализующие структурно-энергетические превращения, характерные для каждой стадии деформации. Произведена оценка влияния формы, размера, наличия одиночных и комплекса АФГ, внедренных в нановолокно, на механизмы атомных перестроек во время деформации. Получено, что общим для всех типов нановолокон при исследуемых температурах является присутствие четырех стадий деформации: упругая, пластическая, течения и разрушения. На каждой стадии реализуются характерные для нее структурные перестройки.

Внедрение одиночных АФГ в нановолокно оказывает влияние на механизмы структурно-энергетических превращений, происходящих в нановолокне во время деформации. Выявлены особенности влияния внедренных САФГ и ТАФГ на области сдвига частей нановолокна и области зарождения очага деформации. Установлено, что наличие одиночных планарных дефектов в нановолокне влияет на местоположение шейки и характер разрушения. Показано, что при внедрении комплекса планарных дефектов, изменяются механизмы и временные интервалы одноосной деформации. Установлено, что при внедрении длиннопериодических АФГ в направлении $\langle 001 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ происходит скольжение участков нановолокна преимущественно по плоскостям $\{111\}$ с «пробиванием» АФГ. В направлении $\langle 011 \rangle$ АФД образуются поворотом участков нановолокна. При увеличении периода антифазности АФГ в направлениях $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ область зарождения деформации находится между двумя ближайшими внедренными АФГ. С увеличением периода антифазности происходит увеличение длительности стадии пластической деформации.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что полученные результаты могут быть непосредственно использованы для развития теории пластической деформации нановолокон, содержащих ДС. Полученные результаты могут найти практическое применение при использовании материалов со сверхструктурой $L1_2(M)$ в качестве наполнителей в нанотрубках или в качестве составных частей в более сложных - композитных наноматериалах. Полученная с помощью компьютерного моделирования атомная структура нановолокон Ni_3Al , содержащих ДС, и варианты ее перестроек могут применяться для анализа электронно-микроскопических изображений высокого разрешения.

Полученные графические изображения дефектов, возникающих в нановолокнах, могут быть использованы в качестве демонстрационного материала для студентов и аспирантов материаловедческих специальностей, на их базе возможно создание работ для лабораторного практикума.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Развитие и особенности структурно-энергетических превращений, происходящих во время высокоскоростной одноосной деформации растяжения в нановолокне Ni_3Al со сверхструктурой $\text{L1}_2(\text{M})$, зависят от формы, ориентации и размера исследуемого нановолокна.
2. Влияние внедренных одиночных АФГ на механизмы структурно-энергетических превращений, происходящих в нановолокне во время деформации, зависит от их типа.
3. Наличие одиночных планарных дефектов в нановолокне влияет на местоположение шейки и характер разрушения.
4. Внедрение комплекса планарных дефектов оказывает влияние на механизмы и временные интервалы одноосной деформации. С увеличением периода антифазности происходит увеличение длительности стадии пластической деформации.

Апробация работы. Результаты работы доложены на международных и российских конференциях и симпозиумах: всероссийских научно-технических конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых «Проблемы социального и научно-технического развития в современном мире» (г.Рубцовск, 2007, 2008), XIV и XV международных научно-практических конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии» (г.Томск, 2008, 2009), XVIII петербургских чтениях по проблемам прочности и роста кристаллов (г.С-Петербург, 2008), III (XXXV) международной научно-практической конференции «Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей» (г.Кемерово, 2008), XLVII международной конференции «Актуальные проблемы прочности» (г.Н.Новгород, 2008), открытой школе-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы – 2008» (г.Уфа, 2008), V всероссийской конференции «Механика микронеоднородных материалов и разрушение» (г.Екатеринбург, 2008), V международной конференции «Фазовые превращения и прочность кристаллов» (г.Черноголовка, 2008), международных симпозиумах «Упорядочение в минералах и сплавах» - OMA-11 и OMA-12 (г.Ростов-на-Дону, п.Лео, 2008, 2009), European Materials Research Society (E-MRS) Fall Meeting and Exhibit (г.Варшава, Польша, 2008), 9-й всероссийской научной конференции «Краевые задачи и математическое моделирование» (г.Новокузнецк, 2008), международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые - науке, технологиям и профессиональному образованию» (г.Москва, 2008), 1-ой международной Казахстано-Российско-Японской конференции «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов» (г.Усть-

Каменогорск, Казахстан, 2008), I⁶ региональной научно-практической конференции «Перспективы развития наноиндустрии Алтая. Анализ состояния патентно-лицензионной деятельности нанотехнологической сети региона» (г.Бийск, 2009), международном симпозиуме «Перспективные материалы и технологии» (г.Витебск, Беларусь, 2009), II всероссийской конференции с Интернет-участием «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к наноиндустрии» (г.Ижевск, 2009), VI международной конференции «Математическое моделирование в образовании, науке и производстве» (г.Тирасполь, Приднестровье, 2009), 12th International Conference on Fracture – ICF (г.Оттава и г.Онтарио, Канада, 2009), III международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» - DFMN-09 (г.Москва, 2009), всероссийской конференции с элементами научной школы для молодежи «Новые материалы. Создание, структура, свойства» (г.Томск, 2009), XVII международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» (г.Самара, 2009), VII международной Российско-Казахстано-Японской научной конференции «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов» (г.Волгоград, 2009). Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы - 2010» (УФА, 2010).

Публикации. Результаты работы опубликованы в 37 статьях в российских и зарубежных изданиях. Число публикаций в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, составляет 4. Синица Н.В. является соавтором зарегистрированного программного продукта, на котором выполнялись расчеты.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 197 наименований. Работа изложена на 196 страницах машинописного текста, содержит 12 таблиц и 87 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание диссертации по главам.

Первая глава диссертации посвящена литературному обзору современных отечественных и зарубежных представлений о структуре и деформации нановолокон с внедренными длиннопериодическими дефектами.

В первой части главы описаны современные виды наноматериалов и нановолокон, применяемых в промышленности, способы их промышленного и лабораторного производства. Дан обзор известных методов компьютерного моделирования, используемых при исследовании свойств наноматериалов. Перечислены потенциалы межатомного взаимодействия, применяемые в методе молекулярной динамики. Во второй части главы представлено описание широкого вида дефектов, возникающих во время деформации

7
нановолокон, в том числе САФГ и ТАФГ. В третьей части диссертации вводится понятие длиннопериодической структуры и сверхструктуры, приводится их определение и классификация. В конце первой главы сформулированы основные задачи диссертационной работы.

Вторая глава посвящена описанию математической модели компьютерного эксперимента моделирования структурно-энергетических превращений в процессе высокоскоростного растяжения нановолокон с внедренными планарными дефектами с различным периодом антифазности (рис.1). Произведен выбор эффективного размера расчетного блока, скорости деформации, методики термостатирования, методики линейного масштабирования, модели термического расширения нановолокна. Подробно представлены используемые визуализаторы атомной структуры и топологии атомов ближайших соседей. Размеры нановолокон в работе составляют от 9270 до 13050 атомов. Плоскости боковых граней выбираются с наиболее плотной упаковкой, так как данное расположение атомов является наиболее энергетически выгодным, а, следовательно, наиболее устойчивым.

В работе используются следующие обозначения видов нановолокон: в начале указывается материал, тип внедренной АФГ, ось растяжения, например, «нановолокно Ni_3Al с внедренной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{ 111 \}$ ».

При моделировании деформации в исследуемых нановолокнах производилось периодически повторяющееся поступательное смещение атомов, составляющих жесткие захваты вдоль оси растяжения нановолокна в противоположных направлениях друг от друга. Дополнительно было смоделировано линейное масштабирование - смещение всех атомов модельного блока вдоль оси растяжения ($\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$) обратно пропорционально удаленности от жестких захватов. Жесткие захваты смещались на 0,001 нм через каждые 0,1 пс.

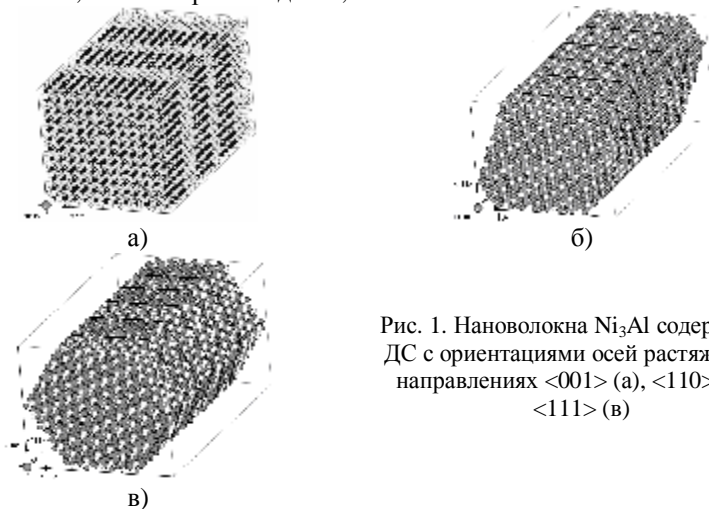


Рис. 1. Нановолокна Ni_3Al содержащие ДС с ориентациями осей растяжения в направлениях $\langle 001 \rangle$ (а), $\langle 110 \rangle$ (б) и $\langle 111 \rangle$ (в)

При моделировании смещения захватов было учтено отношение Пуассона для упругого тела. Модель захватов моделировалась таким образом, что на стадии упругой деформации захваты сжимались в направлении, перпендикулярном оси растяжения (поперечном), с условием, чтобы общий объем захватов не изменялся. Суммарная скорость движения захватов составляла 20 м/с и соответствовала скорости деформации от $2,29 \cdot 10^9$ до $3,39 \cdot 10^9$ с⁻¹ в зависимости от длины исследуемого нановолокна. Такой порядок скоростей встречается в работах по моделированию деформации растяжения/сжатия [9-13]. Температура в компьютерном эксперименте устанавливалась равной 10, 300 и 1100 К. В начале компьютерного эксперимента температура задавалась через скорости атомов, модули которых вычислялись по формуле (1):

$$|v_i| = \sqrt{\frac{2k_b T_0}{m_i}}, \quad (1)$$

где k_b – постоянная Больцмана, T_0 – заданная температура, m_i – масса атома i .

При деформации нановолокна производилось термостатирование с временем реакции термостата $t_r = 0,1$ пс согласно алгоритма Берендсена [14]. Структурная перестройка атомов внутри расчетного блока кристалла была реализована методом молекулярной динамики через решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона, описывающей движение частиц.

Для расчета взаимодействия между атомами выбраны парные потенциальные функции Морза:

$$j_{KL}(|r_i - r_j|) = D_{KL} b_{KL} \left(b_{KL} e^{-a_{KL}|r_i - r_j|} - 2 \right) \quad (2)$$

где j_{KL} – потенциал межатомного взаимодействия атомов сорта K и L , r_i и r_j – радиус-векторы атомов i и j , соответственно, D_{KL} , a_{KL} , b_{KL} – параметры потенциала межатомного взаимодействия между атомами сорта K и L , которые были заимствованы из работы [15]. Данный потенциал является хорошо апробированным для исследуемого интерметаллида [16,17].

В главе описан широкий спектр применяемых визуализаторов, а также методика анализа структуры (определения ГЦК, ГПУ и ОЦК топологии соседей на первой координационной сфере) деформированного нановолокна, предложенная в работе [18].

Для выбора оптимальной длины и сечения нановолокон была проведена серия тестовых компьютерных экспериментов для объектов с различным соотношением длины и площади поперечного сечения. Испытания проводились при температуре 300 К для нановолокон Ni₃Al с внедренными одиночными АФГ с ориентацией оси растяжения в направлении <001>, <011> и <111>. В таблице 1 приводятся тестовые размеры нановолокон и временные интервалы этапов деформации с различными размерами длины и сечения. Из полученных результатов видно, что длина нановолокна влияет на

величину временного интервала начала стадии упругой деформации и длительность стадии пластической деформации. Получено, что при увеличении размера поперечного сечения нановолокна в направлении $\langle 001 \rangle$, без увеличения длины образца, происходит увеличение предела текучестикратно увеличению сечения нановолокна.

Таблица 1

Временные интервалы этапов деформации нановолокон

	Ориентация оси растяжения нановолокна	Размер, атомов (ширина – высота - длина)		
		24-24-72	48-48-36	48-48-72
Начало стадии пластической деформации	$\langle 001 \rangle$	97 пс	42 пс	80 пс
	$\langle 011 \rangle$	56 пс	32 пс	50 пс
	$\langle 111 \rangle$	63 пс	30 пс	57 пс
Время полного разрушения нановолокна	$\langle 001 \rangle$	480 пс	470 пс	475 пс
	$\langle 011 \rangle$	720 пс	530 пс	600 пс
	$\langle 111 \rangle$	546 пс	510 пс	520 пс
Количество атомов расчетного блока	$\langle 001 \rangle$	20736 шт	41472 шт	73728 шт
	$\langle 011 \rangle$	115444 шт	48384 шт	154251 шт
	$\langle 111 \rangle$	18859 шт	10608 шт	37716 шт

Обнаружено влияние длины модельного блока. Длина модельного блока влияет на место зарождения очага деформации и длительность первой (упругой) стадии деформации. В случае, например, когда длина нановолокна в шесть раз больше диаметра поперечного сечения (рис. 2), наблюдается зарождение шести и более очагов деформации.



Рис. 2. Нановолокно Ni_3Al с 1 внедренной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{001\}$
(размер 12-12-144 атома).

В направлениях $\langle 011 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ при увеличении размеров поперечного сечения, без увеличения длины образца, происходит увеличение предела текучестикратно увеличению сечения нановолокна. При увеличении сечения наблюдается кратное увеличение длительности стадии квазиупругой деформации.

Третья глава диссертации посвящена анализу структурно-энергетических превращений, происходящих в атомной структуре нановолокна Ni_3Al , содержащей одиночные САФГ и ТАФГ, при высокоскоростной одноосной деформации растяжения в направлениях $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Для сравнения, анализируются структурные

изменения в бездефектном нановолокне Ni_3Al . Определен механизм локализации очага деформации в зависимости от типа внедренной АФГ. В ходе исследования, выявлены механизмы аморфизации в области бегающей шейки вблизи ТАФГ. Проанализированы изменения величин временных интервалов стадий деформации и значений предела текучести.

В результате исследования структурно-энергетических превращений происходящих в нановолокнах Ni_3Al с внедренными одиночными планарными дефектами в направлении $\langle 001 \rangle$ получено, что общим для всех типов нановолокон при температурах 10, 300 и 1100 К является присутствие четырех стадий деформации: квазиупругой, пластической, течения и разрушения. На каждой стадии деформации реализуются характерные для нее механизмы структурно-энергетических превращений.

Основными показателями, характеризующими процесс и стадийность одноосной деформации, являются графики кривой запасенной энергии и напряжения на жестких захватах (рис. 3.).

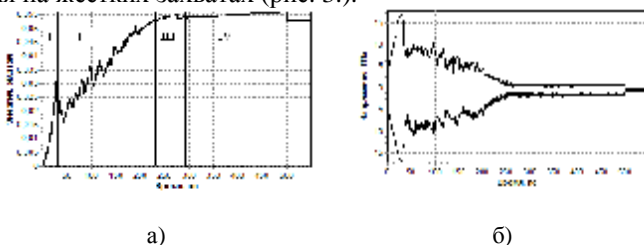


Рис.3. График запасенной энергии нановолокна Ni_3Al (а), график напряжения на захватах нановолокна Ni_3Al (б) с 1 внедренной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{001\}$ при температуре 10 К

Амплитуда колебаний графиков зависимости запасенной энергии деформации от времени растяжения на стадии пластической деформации увеличивается с ростом температуры. Это происходит за счет увеличения амплитуды термических флуктуаций атомов нановолокна.

В случае идеального модельного блока нановолокна первая стадия завершается сдвигом частей нановолокна, который наблюдается вблизи одного из захватов при температуре 10 К (рис. 4).

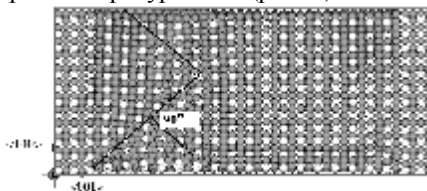


Рис. 4. Картина сдвига атомов вблизи захватов в идеальном нановолокне при температуре 10 К

Сдвиг характеризуется атомными смещениями внутри нановолокна преимущественно по плоскостям $\{111\}$ с последующей локализацией области деформации в одной из частей нановолокна. Образующиеся на

боковой поверхности нановолокна линии скольжения – это ступеньки вышедших на поверхность краевых дислокаций. На пересечении краевых дислокаций образуются сверхструктурные ДУ, что подтверждается появлением атомов с ГПУ топологией ближайших соседей (рис. 5) в плоскости, параллельной плоскости скольжения.

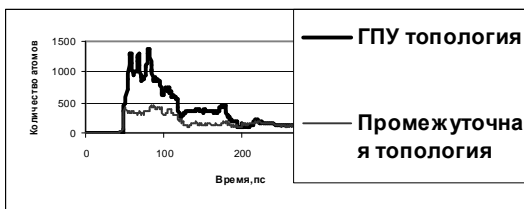


Рис. 5. График зависимости числа атомов с ГПУ и промежуточной топологиями ближайших соседей от времени в нановолокне Ni_3Al с 1 внедренной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ при температуре 10 К

При температуре 10 К объединение АФГ, образовавшихся в момент сдвига, в группы не является устойчивым и в процессе термических флуктуаций атомов АФД может распасться на отдельные ее составляющие. При наличии САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ в центре расчетного блока сдвиг локализуется в одной из частей блока разделенного АФГ (рис. 6).

При наличии термической АФГ состоящей из двух плоскостей Ni-Ni в центре нановолокна атомные смещения могут быть равновероятно локализованы в каждой из частей нановолокна относительно АФГ. Наличие ТАФГ АА, состоящей из пары биатомных плоскостей, приводит к тому, что первая стадия завершается аморфизацией зоны нанокристалла вблизи АФГ (рис. 7.)

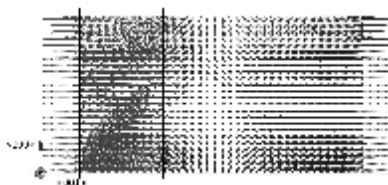


Рис. 6. Картина сдвига атомов вблизи одного из захватов в нановолокне с 1 внедренной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ при температуре 10 К

При повышении температуры до 1100 К в конце первой стадии наблюдается появление элементов аморфизации структуры. Стадия пластической деформации завершается течением с образованием шейки. Характер разрушения двух образовавшихся блоков соответствует хрупкому разрушению при температурах 10 и 300 К и вязкому при повышении температуры до 1100 К.

При внедрении ТАФГ АА и ТАФГ АВ происходит увеличение временных интервалов стадии пластической деформации. При внедрении

САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{001\}$, наоборот, ¹²наблюдается

уменьшение

длительности первой стадии деформации.

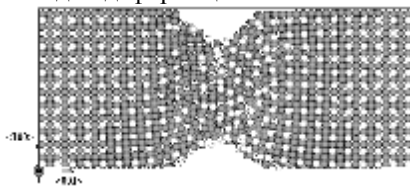


Рис. 7. Аморфизация зоны нанокристалла вблизи ТАФГ АА при температуре 300 К

В направлении $\langle 011 \rangle$ образование АФД в нановолокнах Ni_3Al с внедренными планарными дефектами, такими как САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{011\}$, ТАФГ АА и ТАФГ АВ, происходит по механизму подобному механизму образования субструктурных блоков в нановолокнах чистых металлов с ориентацией оси растяжения в направлении $\langle 011 \rangle$ путем поворота участков нановолокна [19]. Образующиеся АФД ориентированы не параллельно друг другу. Скольжение происходит преимущественно по плоскостям типа $\{111\}$ (рис. 8).

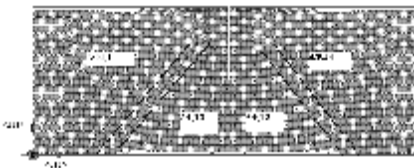


Рис. 8. Нановолокно Ni_3Al с 1 внедренной ТАФГ АВ на 38 пс при температуре 300 К

Отметим отличительной особенностью влияние сдвиговых и термических границ на механизм поворота. Так, в нановолокне с внедренной сдвиговой АФГ во время одноосной деформации дефект оказывает пластифицирующее воздействие на структурно-энергетические превращения в нановолокне.

Обнаружено, что при внедрении в нановолокно САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{011\}$ и ТАФГ АВ в геометрическом центре нановолокна, область деформации равновероятно зарождается в одной из обособленных частей нановолокна. В модельном блоке с внедренной ТАФГ АА происходит преимущественное зарождение очага деформации в области внедренной АФГ. При внедренной АФГ смещенной относительно геометрического центра нановолокна, область деформации локализуется в большем по размеру АФД.

На начальном этапе процесса разрушения происходит фасетирование АФГ, т.е. переориентация отдельных участков нановолокна вдоль различных направлений и ее последующее "разъедание". Длина АФГ увеличивается по сравнению с исходной.

В направлении $\langle 111 \rangle$ обнаружено, что стадия квазиупругой деформации заканчивается сдвигом частей нановолокна друг относительно друга. Преимущественно сдвиг частей нановолокна происходит одновременно по нескольким близлежащим плоскостям $\{111\}$ с коллективной перестройкой атомов в соседние плоскости (рис. 9).

Значительное расщепление плоскостей семейства $\{111\}$ происходит преимущественно в центральной части нановолокна. Ближе к захватам от плоскостей $\{111\}$ отделяются единичные атомы вблизи поверхности. На рис. 9 представлены картины перестройки атомов плоскостей семейства $\{111\}$: на 38 и 42 пс в результате скольжения участков в нановолокне со сдвиговой границей.



Рис. 9. Перестройка атомов плоскостей семейства $\{111\}$ на 38 пс вблизи захвата (а) и в центральной области нановолокна (б) с одиночной внедренной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ при температуре 300 К

Отмечено, что при движении частей нановолокна со сдвиговой границей происходит коллективное смещение группы атомов, которую можно выделить по максимальным относительным смещениям на 37-39 пс. Смещение начинается у поверхности нановолокна на стыке двух свободных поверхностей, преимущественно в одной из частей нановолокна, обособляющей АФГ. Схема блока атомов сместившихся на 37-39 пс на величину от 0,13 до 0,227 нм приведена на рис. 10. Стрелками указаны направления смещений атомов в образовавшемся блоке.

На стадии течения происходит перемещение незначительных групп или одиночных атомов, что выражается в слабом изменении профиля графика запасенной энергии деформации – энергия изменяется не более, чем на 0,02 эВ/атом.

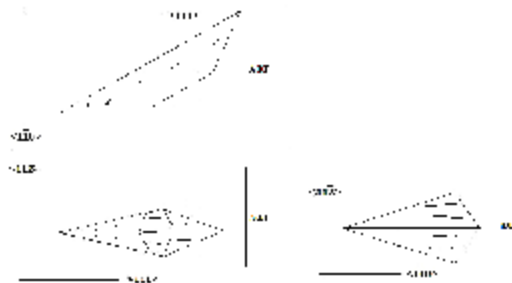


Рис. 10. Схема движения блока атомов и направления смещений атомов на 37-39 пс с одиночной внедренной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$

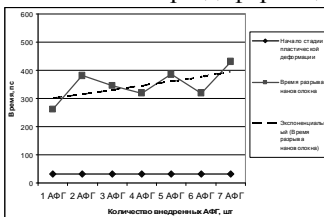
После разрушения в нановолокне, помимо внедренной АФГ, присутствуют планарные дефекты в виде АФГ и точечные дефекты в виде ТДЗ и вакансий. Атомов с ГПУ топологией ближайших соседей после

релаксации в нановолокне не наблюдается, что говорит о восстановлении структуры.

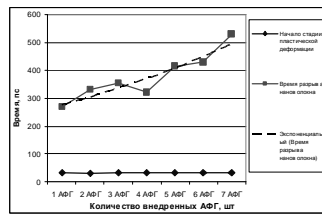
Четвертая глава посвящена исследованиям структурно-энергетических превращений, имеющих место в процессе деформации нановолокон ГЦК интерметаллида Ni_3Al , содержащих ДС. Сравнительный анализ проведен в трех ориентациях: $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Исследована зависимость временных интервалов стадий деформации от периода антифазности. Изучено влияние АФГ на характер структурно-энергетических превращений в нановолокнах Ni_3Al , содержащих ДС. Произведено исследование влияния периода антифазности на значения предела текучести.

Наряду с обнаруженными ранее значениями временных интервалов стадий структурно-энергетических превращений в идеальном нановолокне Ni_3Al [19], в нановолокнах Ni_3Al с внедренным комплексом АФГ наблюдаются изменения в значениях временных интервалов деформации.

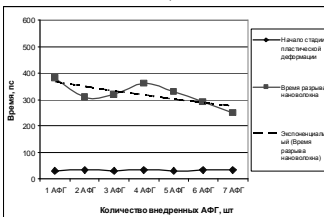
Для исследования влияния АФГ на особенности структурно-энергетических превращений наблюдаемых на каждой стадии деформации нановолокна в направлении $\langle 001 \rangle$, с помощью компьютерных экспериментов рассчитаны значения временных интервалов начала стадии пластической деформации и значения времени, когда происходит разрушение нановолокна Ni_3Al с различным периодом антифазности САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{001\}$ (рис. 11). Результаты, полученные для нановолокон с внедренными ТАФГ АА, ТАФГ АВ, показывают общее уменьшение временных интервалов квазиупругой стадии и стадии пластической деформации на 15-18%. Это наблюдение связано, прежде всего, с тем, что ТАФГ АА и ТАФГ АВ являются высокоэнергетическими дефектами, вызывающими меньшую пластичность сплава при деформации.



а)



б)



в)

Рис. 11. Графики зависимости времени начала стадии квазиупругой деформации и времени разрушения нановолокна с внедренными САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{001\}$ от периода антифазности при температуре 10 К (а), при температуре 300 К (б), при температуре 1100 К (в)

Сравнение значений временных интервалов начала стадии пластической деформации в нановолокне Ni_3Al с внедренными АФГ с данными, полученными для бездефектного нановолокна Ni_3Al , показывает, что в бездефектном нановолокне время начала второй стадии деформации больше и составляет 52-55 пс.

Из рис. 11 (а) видно, что с увеличением числа внедренных АФГ в нановолокне Ni_3Al при температуре 10 К существенно возрастает время до разрушения. Так, с одной внедренной АФГ время до разрушения равняется 262 пс. При 7 внедренных АФГ время разрушения составляет 321 пс. При анализе результатов, полученных при температуре 300 К, наблюдается схожая картина с результатами, полученными при температуре 10 К. С увеличением количества внедренных АФГ увеличивается время до разрушения нановолокна (рис. 11, б). Напротив, при температуре 1100 К с увеличением периода антифазности время до разрушения уменьшается (рис. 11, в).

Показано, что наличие ДС в нановолокне значительно влияет на изменение временных интервалов до разрушения нановолокна Ni_3Al . Обнаружено, что при температурах 10 и 300 К при увеличении периода антифазности САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{001\}$ значительно увеличивается время разрушения. Значение времени до разрушения нановолокна с увеличением периода антифазности (при 7 внедренных АФГ) достигает 150-160% от времени разрушения в нановолокне с 1 внедренной АФГ. Сравнение результатов с данными, полученными для бездефектного нановолокна, показывает увеличение времени разрушения нановолокна с ДС. При температуре 1100 К наблюдается инверсия зависимости времени разрушения нановолокна от количества внедренных АФГ (рис. 11, в). С увеличением количества внедренных САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{001\}$ при температуре 1100 К время разрушения исследуемых образцов уменьшается.

Таким образом, выявлено, что наличие дефектов в виде АФГ значительно влияет на изменение временных интервалов начала стадии пластической деформации. При внедрении АФГ в нановолокно происходит сокращение временных интервалов стадии квазиупругой деформации. Вместе с тем, увеличение периода антифазности АФГ в нановолокне существенно влияет на изменение временных интервалов начала стадии пластической деформации.

В нановолокнах Ni_3Al с внедренными длиннопериодическими АФГ в направлении $\langle 011 \rangle$ наблюдаются изменения в значениях временных интервалов деформации. Рассчитаны значения временных интервалов начала стадии пластической деформации и значения времени разрушения нановолокна Ni_3Al с внедренными длиннопериодическими САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{011\}$. Результаты, полученные для нановолокон с внедренными ТАФГ АА, ТАФГ АВ, показывают общее уменьшение временных интервалов квазиупругой стадии и стадии пластической деформации на 16-20%

При анализе графиков (рис. 12) получено, что значение времени начала стадии пластической деформации для нановолокна с внедренными САФГ $\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{011\}$ составляет 30-39 пс. Отклонение значений временных интервалов с изменением периода антифазности не превышает 1-3 пс, т.е. составляет не более 0,5 % от максимального времени деформации (рис. 12).

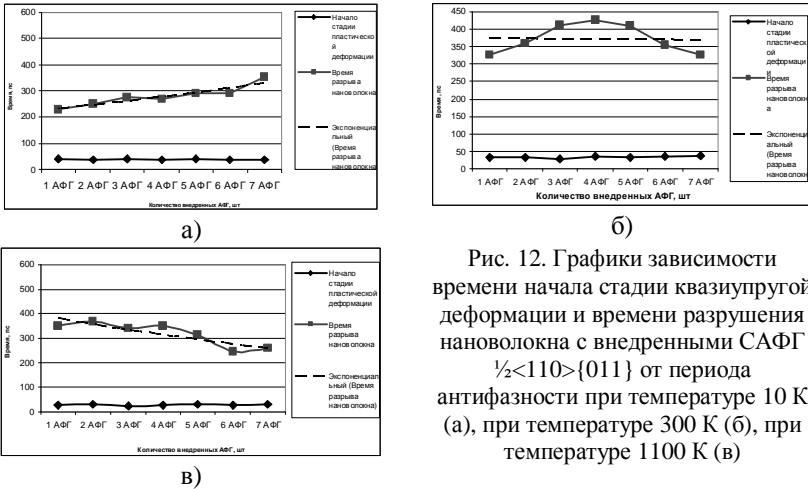


Рис. 12. Графики зависимости времени начала стадии квазиупругой деформации и времени разрушения нановолокна с внедренными САФГ $\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{011\}$ от периода антифазности при температуре 10 К (а), при температуре 300 К (б), при температуре 1100 К (в)

Из рис. 12 (а) видно, что с увеличением числа внедренных АФГ в нановолокне Ni_3Al при температуре 10 К существенно возрастает время до разрушения. Так, с одной внедренной АФГ время до разрушения равно 230 пс. При 6 внедренных АФГ время разрушения составляет 260 пс. При анализе результатов, полученных при температуре 300 К, наблюдаются изменения временных интервалов, по сравнению с результатами, полученными для нановолокна при температуре 10 К. С увеличением количества внедренных АФГ, до 5 АФГ, увеличивается время разрушения нановолокна (рис. 12, б). При периоде антифазности 6 и более наблюдается инверсия увеличения временного интервала стадии разрушения. Напротив, при температуре 1100 К с увеличением периода антифазности время до разрушения уменьшается (рис. 12, в).

Обнаружено, что наличие дефектов в виде АФГ значительно влияет на изменение временных интервалов начала стадии пластической деформации. Увеличение периода антифазности в нановолокне в направлении $\langle 011\rangle$ приводит к сокращению временных интервалов стадии квазиупругой деформации.

Для исследования влияния АФГ на особенности протекания стадий деформации в нановолокне в направлении $\langle 111\rangle$, содержащего ДС, с помощью компьютерных экспериментов рассчитаны значения временных интервалов начала стадии пластической деформации и значения времени разрушения нановолокна Ni_3Al с внедренными САФГ $\frac{1}{2}\langle 110\rangle\{111\}$ (рис. 13).

Обнаружено, что наличие дефектов в нановолокне в виде длиннопериодических АФГ, существенно влияет на изменение временных интервалов начала стадии пластической деформации. Величина периода антифазности в нановолокне существенно влияет на значения временных интервалов начала стадии пластической деформации (рис. 13). Так, при повышении температуры с 10 до 1100 К время начала стадии квазиупругой деформации уменьшается в среднем на 6-10 пс.

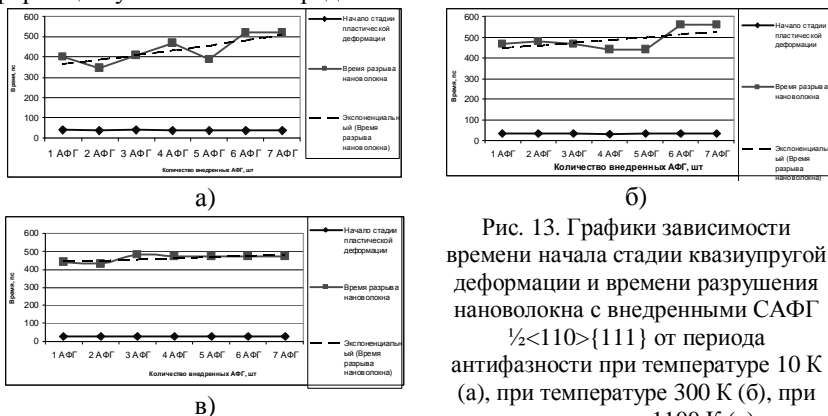


Рис. 13. Графики зависимости времени начала стадии квазиупругой деформации и времени разрушения нановолокна с внедренными САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ от периода антифазности при температуре 10 К (а), при температуре 300 К (б), при температуре 1100 К (в)

Из рис. 13 (а) видно, что с увеличением периода антифазности в нановолокне Ni_3Al при температуре 10 и 300 К увеличивается время до разрушения. Так, с одной внедренной АФГ при температуре 10 К время до разрушения равняется 400 пс. При 7 внедренных АФГ время разрушения составляет 520 пс. Среднее время разрушения составляет 450 пс. При температуре 1100 К с увеличением периода антифазности время до разрушения существенно не изменяется (рис. 13).

Таким образом, показано, что наличие АФГ в нановолокне влияет на изменение временных интервалов разрушения нановолокна Ni_3Al при пластической деформации. Обнаружено, что при температурах 10 и 300 К при увеличении количества внедренных САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ увеличивается время разрушения. Значение времени разрушения нановолокна с увеличением периода антифазности (при 7 внедренных АФГ) увеличивается в среднем на 20-25% от времени разрушения в нановолокне с 1 внедренной АФГ. При температуре 1100 К не наблюдается каких-либо изменений времени разрушения нановолокна при внедрении АФГ.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. При деформации растяжения нановолокон ГЦК интерметаллида Ni_3Al с внедренными одиночными и комплексом АФГ прослеживаются четыре стадии структурно-энергетических превращений: квазиупругая, пластическая, течения и разрушения. Ориентация оси растяжения влияет на особенности структурно-энергетических превращений в нановолокне Ni_3Al с

внедренными АФГ. Устойчивым к деформации является нановолокно с наиболее плотно упакованными боковыми гранями.

2. Длина нановолокна влияет на величину временного интервала начала стадии упругой деформации и длительность стадии пластической деформации. При увеличении размеров поперечного сечения, без изменения длины образца, происходит увеличение предела текучести кратно изменению сечения нановолокна. При увеличении длины нановолокна, без изменения сечения образца, происходит увеличение длительности стадии квазиупругой деформации кратно изменению длины нановолокна.

3. В нановолокнах с внедренной одиночной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ в центре расчетного блока, сдвиг локализуется в одной из частей блока разделенного АФГ. При наличии одиночной ТАФГ АВ, сдвиги локализованы в каждой из частей нановолокна, относительно АФГ. Наличие одиночной ТАФГ АА приводит к тому, что первая стадия завершается аморфизацией зоны нанокристалла вблизи АФГ. Указанные превращения характерны для ориентаций $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$. При внедрении одиночной АФГ происходит снижение величины предела текучести.

4. При наличии одиночной САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ шейка сохраняется в части блока между АФГ и захватом, в которой началась пластическая деформация. При внедрении одиночной ТАФГ АА в ориентации $\langle 011 \rangle$, пластическая деформация локализуется в центре блока нанокристаллов (при температурах эксперимента 10 и 300 К), а при температуре 1100 К шейка перемещается в сторону одного из захватов. Характер разрушения блоков соответствует хрупкому разрушению при низких температурах и вязкому при высоких температуры.

5. При температурах 10 и 300 К с увеличением периода антифазности САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ происходит увеличение длительности стадии пластической деформации, увеличивается время до разрушения. Происходит циклический процесс «проскальзывание частей нановолокна – локализация сдвига на длиннопериодической АФГ - восстановление ГЦК структуры». При внедрении комплекса ТАФГ временные интервалы пластической деформации снижаются.

6. При увеличении периода антифазности САФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{011\}$ увеличивается время разрушения. Значение времени разрушения нановолокна с увеличением периода антифазности достигает 1,5-1,6 раза от значений временных интервалов в идеальном нановолокне Ni_3Al .

7. В направлении $\langle 111 \rangle$ при внедрении комплекса АФГ в нановолокно происходит сокращение пороговых значений временных интервалов стадии квазиупругой деформации. С увеличением периода антифазности увеличивается время до разрушения. При повышении температуры временные интервалы стадий деформации при увеличении периода антифазности существенно не изменяются.

ЛИТЕРАТУРА

1. Андриевский Р.А., Глезер А.М. Прочность наноструктур. –М.:УФН, 2009. С.337-357.
2. Koh S.J.A., Lee H.P. Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires // *Nanotechnology*. - 2006. – V. 17. – P. 3451–3467.
3. Третьяков Ю.Д. Нанотехнологии. Азбука для всех. - М.: Физматлит, 2008. - 368 с.
4. Gleiter H. Deformation of polycrystals // *Proc. 2-nd RISO Inter. Sympos. Metallurgy and Materials Science*. Ed. Hansen N. et al. – Denmark, Roskilde: RISO Nat. Lab, 1981. - P. 15.
5. Раков Э.Г. Нанотрубки и фуллерены. - М.: Физматкнига; Логос, 2006.- 374 с.
6. Гусев А.И. Нанокристаллические материалы: методы получения и свойства. - Екатеринбург: УрО РАН, 1998. - 200 с.
7. Поздняков В.А. Физическое материаловедение наноструктурных материалов. – М.: МГИУ, 2007. - 424 с.
8. Старенченко С.В., Козлов Э.В., Старенченко В.А. Закономерности термического фазового перехода порядок - беспорядок в сплавах со сверхструктурами. – 2007. – Томск: НТЛ. - 268 с.
9. . Liang W., Zhou M. Size and strain rate effects in tensile deformation of Cu nanowires // *Nanotech*. – 2003. - V. 2. – P. 452-455.
10. Ji C., Park H.S. Geometric effects on the inelastic deformation of metal nanowires // *Appl. Phys. Lett*. – 2006. – V. 89. – P. 181916.
11. Park H.S., Laohom V. Surface composition effects on martensitic phase transformation in nickel aluminum nanowires // *Philosophical Magazine*. – 2007. - V. 87. – P. 2159-2168.
12. Koh S.J.A., Lee H.P. Molecular dynamics simulation of size and strain rate dependent mechanical response of FCC metallic nanowires // *Nanotechnology*. - 2006. – V. 17. – P. 3451–3467.
13. Зольников К.П. Нелинейный отклик материалов на макромасштабном уровне при высокоэнергетических воздействиях. Автореферат диссертации на соискание ученой степени д. ф.-м. н. - Томск, 2002. - 35 с.
14. Berendsen H.J.C., et al. Molecular-dynamics with coupling to an external bath // *J. Chem. Phys*. - 1984. – V. 81, № 8, P. 3684-3690.
15. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B и $A_3B(C)$. Диссертация на соискание ученой степени к. ф.-м. н. - Томск, 1987. - 214 с.
16. Ракитин Р.Ю. Исследование механизмов диффузии по границам зерен в ГЦК металлах. Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.ф.-м. н. - Барнаул, 2006. - 23 с.
17. Полетаев Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в ГЦК

металлах. Автореферат диссертации на соискание ученой степени д. ф.-м. н. - Барнаул, 2008. - 38 с.

18. Van Swygenhoven H., Farkas D., Caro A. Grain-boundary structures in polycrystalline metals at the nanoscale // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 62, № 2. - P. 831-838.

19. Яшин А.В. Исследование стадий деформации нановолокон ряда металлов и сплава Ni_3Al на основе ГЦК решетки. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук, Барнаул, 2010. – 221 с.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

Статьи, опубликованные в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ:

1. Старостенков М.Д., **Синица Н.В.**, Яшин А.В. Структурная перестройка в нановолокне Ni_3Al , содержащем планарные неконсервативные антифазные границы, при высокоскоростной одноосной деформации растяжения С. 1072-1073 // Вестник Тамбовского университета (ТГУ), Сер. Естественные и технические науки, - Тамбов, 2010. - Т.15, Вып. 3, Часть 1. – 376 с. – ISSN 1810-0198.

2. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.** Исследование структурных превращений в сплаве Ni_3Al под действием одноосной деформации растяжением // Деформация и разрушение материалов. – 2009. - № 6. - С. 28-31.

3. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е. Структурно-энергетические превращения в металлических нановолокнах в условиях высокоскоростной динамической деформации растяжения // Перспективные материалы. - 2009. - Специальный выпуск №7. - С. 383-388.

4. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., **Синица Н.В.**, Яшин А.В., Хорошилов Д.Е. Механизмы структурной перестройки в модели нановолокна интерметаллида Ni_3Al , содержащего длиннопериодические антифазные границы, в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2010. – №8. – С. 47-54.

Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ:

5. Дудник Е.А., **Синица Н.В.**, Старостенков М.Д., Яшин А.В. Моделирование структурных превращений в сплавах методом молекулярной динамики при различных температурах с использованием парных потенциалов Морза (ДИНАМИКА). - Свидетельство об официальной регистрации программ для ЭВМ №2007611472 от 09.04.2007 г.

Прочие статьи:

6. **Синица Н.В.**, Яшин А.В., Старостенков М.Д. Влияние антифазных границ на деформационные характеристики нановолокна Ni_3Al . // Тезисы докладов открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и

- наноструктурные материалы - 2010» (УМЗНМ-2010), УФА, 2010, С. 264.
7. **Синица Н.В.** Изучение одноосной деформации в интерметаллиде Ni_3Al , содержащем антифазные границы. Часть 1. В сборнике материалов XVIII петербургских чтений по проблемам прочности и роста кристаллов. С-Петербург, 21-24 октября 2008 г. С. 261-263.
8. **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е., Яшин А.В. Исследование конфигурации сдвиговой антифазной границы в интерметаллиде Ni_3Al методом молекулярной динамики. XIV международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии»/ Сборник трудов в 3-х томах. Т.3.-Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008.-621 с. С.111-113.
9. **Синица Н.В.**, Яшин А. В. Исследование структурных превращений в трехмерном сплаве Ni_3Al методом молекулярной динамики. ВНКСФ-13. Материалы конференции, информационный бюллетень. АСФ России 2007.- Екатеринбург, 2007.-237 с. С.146-147.
10. **Синица Н.В.**, Старостенков М.Д., Хорошилов Д.Е., Яшин А.В., Дудник Е.А. Влияние концентрации точечных дефектов на особенности процесса деформации и разрушения нановолокна интерметаллида Ni_3Al // Сборник тезисов XVII международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов» – Самара: Самарский государственный технический университет. - 2009. – С. 212-213.
11. **Синица Н. В.**, Яшин А. В., Хорошилов Д. Е., Дудник Е. А., Старостенков М. Д. Компьютерное моделирование структурно-энергетических превращений в нановолокне Ni_3Al , содержащем антифазные границы, при одноосной деформации // От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к наноиндустрии: тезисы докладов II всероссийской конференции с Интернет-участием (8-10 апреля). – Ижевск: Изд-во ИжГТУ, 2009, 152 с. С. 105.
12. **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е. Конфигурация консервативной антифазной границы в сплаве типа A_3B . С.498-501. Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей: материалы III (XXXV) международной научно-практической конференции / Кемеровский госуниверситет.-Кемерово: ООО «ИНТ», 2008. – Вып.9.-Т.1. -539 с. 13.
13. **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е., Яшин А.В. Исследование поведения антифазной границы в сплаве Ni_3Al в ориентации призмы. Проблемы социального и научно-технического развития в современном мире: Материалы X всероссийской научно-технической конференции 17-18 апреля 2008г./Рубцовск. – Рубцовский индустриальный институт, 2008.-202с. С.194-197.
14. Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е., Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Исследование участков сверхструктурных разрушений при одноосной динамической деформации в сплаве Ni_3Al // МОЛОДЫЕ УЧЕНЫЕ – 2008 // Материалы международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые - науке, технологиям и профессиональному образованию»,

- 10-13 ноября 2008 г., г. Москва. /²² Под. ред. чл.-корр. РАН А.С. Сигова. – М.: Энергоатомиздат, 2008, часть 3. – 219 с. С. 160-163.
15. Яшин А.В., **Синица Н.В.** Влияние деформации на намагниченность в сплавах // Сборник трудов XIV международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии».- Томск: Изд-во Томского политехнического университета. – 2008. - Т.3.- С.154-156.
16. Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Дудник Е.А., Старостенков М.Д. Процессы атомной перестройки при динамическом растяжении // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2008. – №5. - С. 16-20.
17. Дудник Е.А., **Синица Н.В.**, Яшин А.В., Старостенков М.Д. Исследование влияния дефекта упаковки на структурные превращения в упорядочивающихся сплавах и интерметаллидах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2008. - №3. - С. 79-83.
18. Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е., Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Исследование перераспределения атомных связей на участках структурных разрушений в сплаве Ni₃Al // Сборник статей 9-й всероссийской научной конференции «Краевые задачи и математическое моделирование» – Новокузнецк: НФИ ГОУ ВПО «КемГУ», 2008. – Т.2. – С. 95-98.
19. Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е., Старостенков М.Д., Дудник Е.А. Исследование участков сверхструктурных разрушений при одноосной динамической деформации в сплаве Ni₃Al // Материалы международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые - науке, технологиям и профессиональному образованию». - М.: Энергоатомиздат. - 2008. – Ч. 3. - С. 160-163.
20. Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е., Дудник Е.А., Старостенков М.Д. Компьютерное моделирование структурно-энергетических превращений в нановолокне Ni₃Al при одноосной деформации // Тезисы докладов II всероссийской конференции с Интернет-участием «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к nanoиндустрии». - Ижевск: Изд-во ИжГТУ. – 2009. - С. 143.
21. Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Кононов И.Н. Структурные и сверхструктурные изменения, происходящие в нановолокне Ni₃Al в процессе высокоскоростной деформации // Сборник трудов XV международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Современная техника и технологии» – Томск: Изд-во Томского политехнического университета. – 2009. - Т. 3.– С. 545-547.
22. Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Дудник Е.А., Старостенков М.Д. Исследование структурно-энергетических превращений в сплаве Ni₃Al с антифазными границами при внешних воздействиях. Труды Рубцовского индустриального института: Выпуск 16: Естественные науки / Под редакцией Апполонова А.А., Дудник Е.А./ Рубцовский индустриальный институт.-Рубцовск, 2007.- 61 с. С. 54-61.

23. Дудник Е. А., Яшин А. В., ²³ **Синица Н.В.**, Старостенков М.Д. Анализ структурно-энергетических превращений вблизи планарных дефектов в сплаве Ni₃Al. С. 65-70. // Краевые задачи и математическое моделирование [текст]: сб. ст. 9-й всероссийской научной конференции. 28-29 ноября 2008 г., Новокузнецк. В 3 т. Т. 2./ НФИ ГОУ ВПО «КемГУ»; под общ. Ред. В. О. Каледина. – Новокузнецк, 2008. – 130 с.
24. Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.**, Старостенков М.Д. Исследование упругой стадии деформации при одноосном динамическом растяжении // Материалы XVIII петербургских чтений по проблемам прочности и роста кристаллов. - С-Петербург, 2008. - С. 59-61.
25. Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.** Исследование влияния одноосной деформации на свойства сплавов сверхструктуры L1₂ // Сборник тезисов докладов открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы – 2008» – Уфа, Башкирский государственный университет, 2008. - С. 240-241.
26. Starostenkov M.D., Yashin A.V., **Sinitsa N.V.** Atomic mechanisms of structural reconstruction of nanocrystal FCC at an impulsive deformation // Book of Abstract: 2008 E-MRS Fall Meeting and Exhibit. – Aug. 2008. - PP. 170.
27. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.** Исследование структурных превращений в бинарном сплаве под действием деформации растяжения // Материалы XLVII международной конференции «Актуальные проблемы прочности». - Н.Новгород, 2008 – С. 48-50.
28. Starostenkov M.D., Yashin A.V., **Sinitsa N.V.**, Dudnik E.A. Atomic mechanisms of structural reconstruction of FCC-metals in the process of tension deformation // CD disk, Proceedings of 12th International Conference on Fracture. – 2009. - Ottawa, Ontario, Canada. - fin00236, PP. 1-9.
29. Дудник Е.А., Старостенков М.Д., Яшин А.В., **Синица Н.В.** Исследование механизмов разрушения в сплаве Ni₃Al под действием деформации растяжения // Сборник материалов V всероссийской конференции «Механика микронеоднородных материалов и разрушение». - Екатеринбург: ИМАШ УрО РАН, 2008. - С.39.
30. Глезер А.М., Старостенков М.Д., Дудник Е.А., Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е. Исследование атомных механизмов перестройки в сплаве Ni₃Al при одноосной деформации растяжения // Труды 11-го международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-11). - Ростов-на-Дону, п. Лоо: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН. – 2008. – Т. 1. - С. 141-144.
31. Тажибаева Г.Б., Квеглис Л.И., Дудник Е.А., Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Абылкалыкова Р.Б., Носков Ф.М. Структурные и магнитные превращения в сплаве Ni₃Al // Материалы 1-й международной казахстано-российско-японской конференции «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов». - г.Усть-Каменогорск, ВКГТУ. – 2008. - С. 446-451.

32. Старостенков М.Д., Яшин А.В.,²⁴ Дудник Е.А., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е. Исследование динамической деформации нановолокна Ni_3Al с осью растяжения $\langle 111 \rangle$ // Материалы I региональной научно-практической конференции «Перспективы развития nanoиндустрии Алтая. Анализ состояния патентно-лицензионной деятельности нанотехнологической сети региона». – Бийск: ФГУП «ФНПЦ «Алтай». – 2009. - С. 35-36.
33. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.** Исследование атомных механизмов разрушения нановолокон // Тезисы VI международной конференции «Математическое моделирование в образовании, науке и производстве» – Тирасполь: Изд-во Приднестровского университета. – 2009. - С. 98-99.
34. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е. Исследование атомных механизмов перестройки в сплаве Ni_3Al при одноосной деформации растяжения в направлении $\langle 110 \rangle$ // Труды 12-го международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-12). - Ростов-на-Дону, п. Лоо: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН. – 2009. - Т. 2. – С. 252-256.
35. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е. Исследование процессов атомной перестройки в нановолокне сплава Ni_3Al , подвергнутого одноосной деформации растяжения в направлении $\langle 110 \rangle$ // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2009. - №1. - С. 74-80.
36. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е. Исследование нановолокон металлов и сплавов на основе ГЦК-решетки // Сборник материалов III международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (DFMN-09). - М: Интерконтакт Наука. - 2009. - С. 395-396. Глезер А.М. Исследование атомных механизмов перестройки в сплаве Ni_3Al при одноосной деформации растяжения [Электронный ресурс] /
37. А.М. Глезер, Старостенков М.Д., Дудник Е.А., Яшин А.В., **Синица Н.В.**, Хорошилов Д.Е. // Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы. – 2009, № 10. – Режим доступа: <http://www.ptosnm.ru/catalog/i/470>.
Дата обращения: 01.02.2010.

Подписано в печать 21.10.2010.

Печать - цифровая. Усл.п.л. 1,39.

Тираж 100 экз. Заказ 2010 - 132

Отпечатано в типографии АлтГТУ,

656038, г. Барнаул, пр-т Ленина, 46

тел.: (8-3852) 36-84-61

Лицензия на полиграфическую деятельность ПИД №28-35 от 15.07.97 г.