

КОНДЕНСАЦИЯ ЛАНҒАН КҮЙДІҢ ФИЗИКАСЫ ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.95.405

Д.Л.Алонцева, Н.В.Прохоренкова

*Восточно-Казахстанский государственный технический университет
им. Д.Серикбаева, Усть-Каменогорск (E-mail: dalontseva@mail.ru)*

Модификация облучением структурно-фазового состояния и свойств порошковых покрытий, нанесенных плазменной струей на стальные подложки

В статье обсуждены результаты исследования общих закономерностей воздействия электронного облучения на структурно-фазовое состояние и свойства защитных порошковых покрытий на основе Ni-Cr с целью выработки практических рекомендаций по модификации их эксплуатационных свойств (твердости, износостойкости, коррозионной стойкости) облучением. На основе экспериментальных данных просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии и рентгеноструктурного фазового анализа разработана модель строения толстых (до 300 мкм) порошковых покрытий, нанесенных высокоскоростной плазменной струей на стальные подложки.

Ключевые слова: порошковые покрытия, плазменная струя, электронный пучок, структурно-фазовое состояние, эксплуатационные свойства.

Введение

В последнее время интенсивно разрабатываются плазменно-детонационные технологии для формирования порошковых защитных покрытий и радиационно-пучковые технологии для их модифицирования, а также для модификации поверхности сталей и сплавов. Физическую основу данных технологий представляют процессы взаимодействия заряженных частиц с твердым телом, а при больших плотностях мощности пучков (более 105 Вт/см^2) основным их воздействием на поверхность, помимо радиационного, является термическое [1, 2], что позволяет рассматривать электронное излучение и плазменные струи как концентрированные энергетические потоки.

Улучшение механических и трибологических свойств защитных покрытий из порошковых сплавов при электронном облучении может быть реализовано путем формирования в них ультрамелкозернистых структур или наноразмерных интерметаллидных соединений. Основная особенность интерметаллидных соединений — высокая твердость и износостойкость наряду с удовлетворительной пластичностью; способность сохранять прочность и структуру при высоких температурах [2]. Интерметаллиды в ультрамелкозернистом или в наноструктурном состоянии могут повысить пластичность конструкционных материалов, работающих при высоких температурах, не снижая их прочностных характеристик. В настоящее время способы упрочнения сплавов путем формирования в них наноразмерных интерметаллидов мало изучены, хотя они очень перспективны, особенно при модификации металлических покрытий пучками заряженных частиц, так как особенно эффективно наноструктурированные состояния достигаются при высоких скоростях нагрева и при малом времени воздействия высоких температур [3, 4]. Улучшение эксплуатационных характеристик происходит за счет структурно-фазовых превращений в материале, обусловленных, в основном, термическим и механическим воздействием и радиационно-стимулированной диффузией [5]. Научной основой для модификации материалов в данном случае является выяснение общих закономерностей структурно-фазовых превращений, протекающих при электронном облучении изучаемых материалов. Для того чтобы разработать общие модели поведения данных материалов при высокоэнергетическом воздействии и дать

практические рекомендации по режимам воздействия, ведущим к оптимизации механических и эксплуатационных свойств, необходимо хорошее знание материаловедческих аспектов для конкретных материалов.

На основании исследования структуры данных покрытий, результаты которого представлены в наших работах [6–9], была предложена схема их строения, положенная в основу модели двухслойного покрытия, нагреваемого движущимся плоским осесимметричным источником. Были рассчитаны формирующиеся при облучении температурные поля и рекомендованы режимы облучения [10, 11], приводящие к оплавлению поверхности покрытий и нагреву покрытий до определенных температур на границе с подложкой, чтобы обеспечить выделение интерметаллидных фаз (в соответствии с диаграммами фазового состояния) и ускорить диффузионные процессы.

Целью настоящего исследования являлось установление общих закономерностей воздействия электронного облучения на структурно-фазовое состояние и свойства защитных порошковых покрытий на основе Ni-Cr с целью выработки практических рекомендаций по модификации их эксплуатационных свойств (твердости, износостойкости, коррозионной стойкости) облучением.

Объекты и методика эксперимента

В плазменно-детонационной установке «Импульс-6» на подложке из углеродистой стали обыкновенного качества Ст. 3 (Fe — основа, C — 0,25 вес.%, Mn — 0,8 вес.%, Si — 0,37 вес.%, P < 0,045 вес.%) формировались защитные покрытия толщиной от 150 до 300 мкм из порошковых сплавов на основе Ni: ПГ-10Н-01 (Ni-осн.; Cr — 14...20 вес.%; В — 3,3 вес.%; Si — 4,8 вес.%; Fe до 7 вес.%; C — 0,8 вес.%) и ПГ-АН-33 (Ni-осн.; Cr — 19–24%; Mo — 4%; В — 2%; Si — 2%; W — 1%), ГОСТ 28377–89. Для напыления применялся порошок с размером фракций от 56 до 100 мкм. В качестве материала подложки использовались стальные образцы размером 20x30x10 мм³, поверхность которых предварительно подвергалась пескоструйной обработке. Порошковые покрытия осаждались в воздушной среде со следующими параметрами импульсно-плазменной обработки: расстояние от подложки до среза сопла установки 60 мм; скорость перемещения образца 360 мм/мин, расход порошка 21,6 г/мин, частота следования импульсов 4 Гц (частота детонации). Плотность электрического тока в плазменной струе может варьироваться от 1 до 7 А/см², средние температуры потока плазмы на срезе сопла установки достигают величин порядка нескольких тысяч С, средний диаметр струи на образце 25 мм, длительность импульса порядка 10 мкс [1, 374–379], эродирующий электрод — Мо.

Облучение образцов со стороны покрытий по расчетным режимам (описание процедуры расчетов приводится в работах [10, 11]) проводили в вакууме электронным пучком на источнике «У-212» с ускоряющим напряжением 30 кВ в непрерывном режиме. Развертка пилообразная, скорость перемещения пучка в горизонтальном направлении 360 мм/мин, диаметр пучка электронов на образце 10 мм, сила тока 20–30 мА.

Исследования структуры поверхности и морфологии проводили методами сканирующей электронной микроскопии на JSM-6390LV («JEOL», Япония) с приставкой энергодисперсионного анализа INCA ENERGY («Oxford Instruments», Великобритания). Топографию поверхности покрытий исследовали на атомно-силовых микроскопах JSPM-5200 («JEOL», Япония) и NT-206 (Белоруссия). Шероховатость поверхности оценивали согласно ГОСТу 2789-7, сравнивая Ra — среднее арифметическое отклонение профиля для покрытий до и после модификации облучением. Металлографическое исследование образцов всех исследуемых материалов проводили на инвертированном фотомикроскопе отраженного света Neophot-21 («Carl Zeiss», Германия) и на металлографическом микроскопе МИМ-7. Использовали электролитическое травление образцов.

Для изучения структурно-фазового состава покрытий и подложек применяли рентгеновский дифрактометр X'Pert PRO («PANalytical», Нидерланды), дополнительно для анализа покрытий использовали метод скользящего рентгеновского пучка. Для определения элементного состава покрытий и стальной подложки применяли рентгенофлуоресцентный спектральный анализ с использованием рентгеновских спектрометров JSX-3100RП («JEOL», Япония) и СРВ-1 («Техноаналит», Казахстан).

Испытания на микротвердость всех образцов проводили на приборе ПМТ-3 по косым шлифам. Испытания покрытий на износостойкость проводили путем измерения объемного уноса материала на установке СМТС-2 (Украина) по схеме «плоскость-цилиндр» в среде технического вазелина. Для проведения коррозионных испытаний использовали потенциостат ПИ–50.1.1, оценивая потенциалы, токи и скорости коррозии покрытий и подложки в кислой среде.

Результаты измерений подвергались стандартной статистической обработке. Проведено сравнение структуры и свойств покрытий до и после их модификации облучением. Проанализирована эволюция микроструктуры и фазового состава покрытий, обусловленная нагревом при облучении.

Результаты эксперимента

Поверхность плазменно-детонационных покрытий представляет собой неоднородный по высоте слой со средним значением параметров шероховатости $Ra = 400$ нм для ПГ-АН-33 (рис. 1, а) и 121,6 нм — для ПГ-19Н-01 (рис. 1, в)).

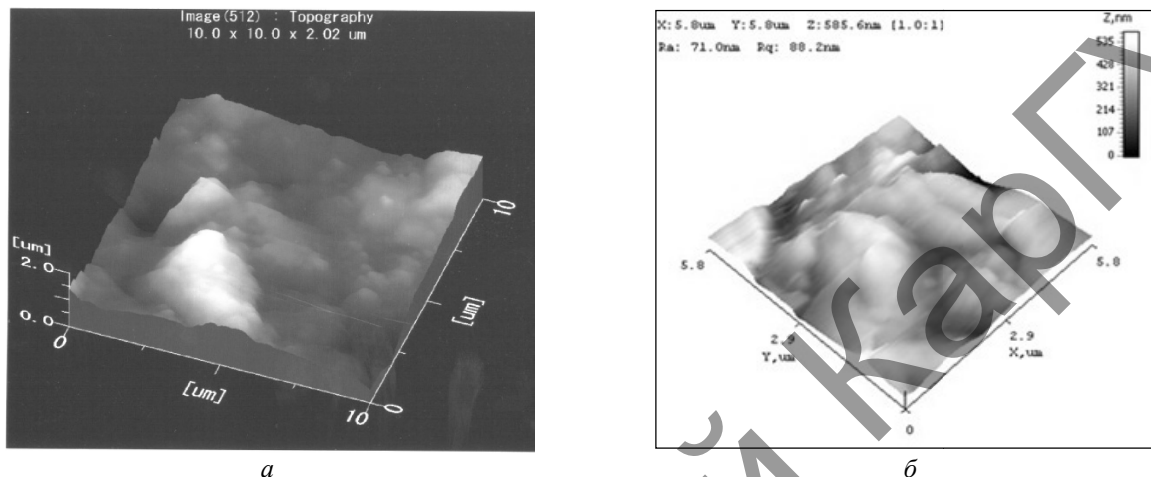


Рисунок 1. Топография поверхности плазменно-детонационных покрытий из ПГ-АН-33 (а) и ПГ-10Н-01 (б)

После электронного облучения поверхность покрытий оплавляется, как было рассчитано, и шероховатость покрытий резко уменьшается (рис. 2). Средние значения параметров шероховатости модифицированных покрытий Ra составляют 100,0 нм для ПГ-АН-33 (рис. 2 а) и 18,0 нм — для ПГ-10Н-01 (рис. 2, б).

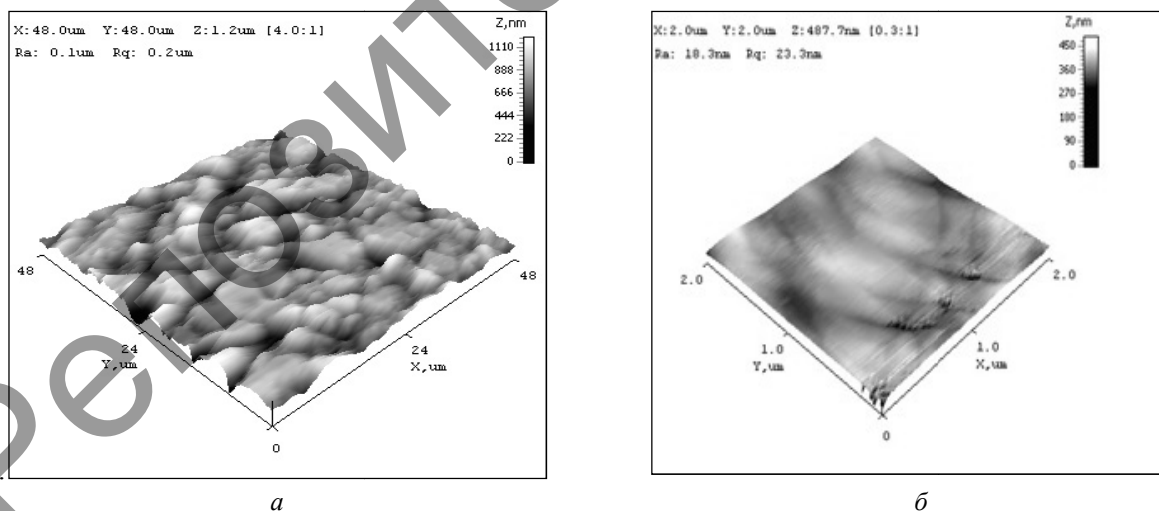


Рисунок 2. Топография поверхности плазменно-детонационных покрытий из ПГ-АН-33 (а) и ПГ-10Н-01 (б) после электронного облучения

Установлено, что в результате модификации покрытий облучением их микротвердость увеличилась в среднем на 25 % (рис. 3), а их износостойкость возросла до 3 крат (рис. 4). Очевидно изменение характера распределения микротвердости по сравнению с необлученными покрытиями (рис. 3). Ширина упроченной переходной (диффузионной) зоны от покрытия к подложке увеличивается и достигает в среднем 150 мкм.

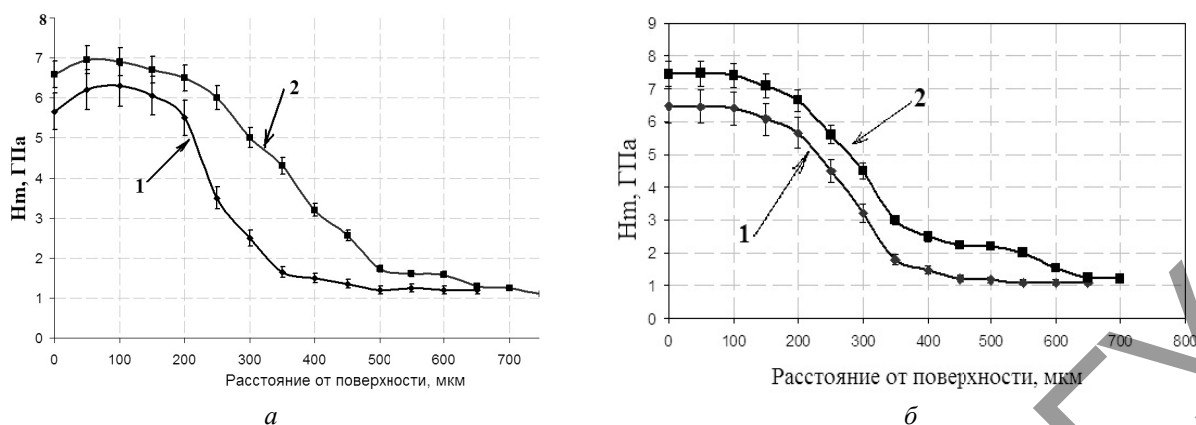


Рисунок 3. Графики распределения микротвердости по глубине покрытий из ПГ-19Н-01(а) и из ПГ-АН-33 (б) от поверхности до (нижние кривые) и после дополнительного облучения (верхние кривые)

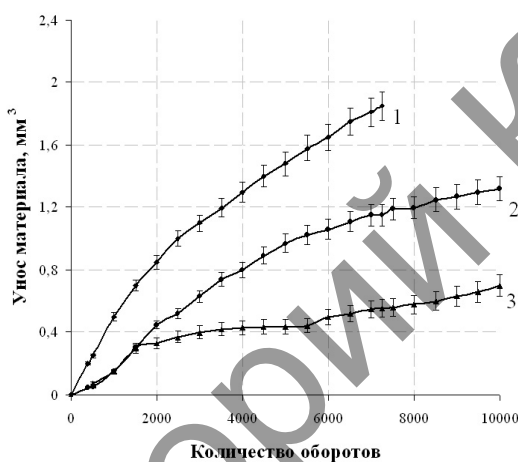


Рисунок 4. Кривые износа, полученные на подложке (1), исходных покрытиях (2) и после модификации (3) покрытий из порошка ПГ-10Н-01 облучением

Методом энергодисперсионного спектрального анализа фиксируется проникновение Ni и Si из облученных покрытий в подложку, вид границы модифицированного покрытия с подложкой и карта распределения соответствующих элементов для покрытия из ПГ-10Н-01 представлена на рисунке 5. Микроструктура покрытия из ПГ-АН-33 после облучения показана на рисунке 6. Формируется мелкозернистая однородная микроструктура со средним размером зерна 2 мкм (рис. 6).

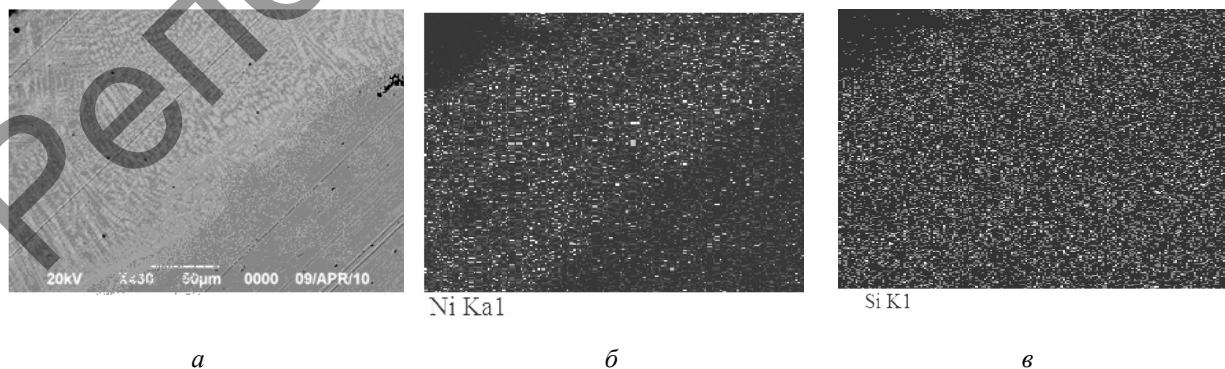


Рисунок 5. Изображение поперечного сечения покрытия из ПГ-10Н-01 на стальной подложке после облучения электронами (а) и соответствующая карта распределения Ni (б) и Si (в) в покрытии и подложке

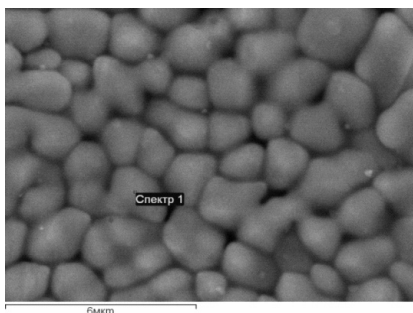


Рисунок 6. Микроструктура покрытия из ПГ-АН-33 после облучения

Объемная доля твердого раствора на основе Ni в покрытиях увеличивается после облучения среднем на 5–9 %, согласно данным рентгеноструктурного фазового анализа, число интерметаллидных фаз-соединений Ni с Fe возрастает (рис. 7).

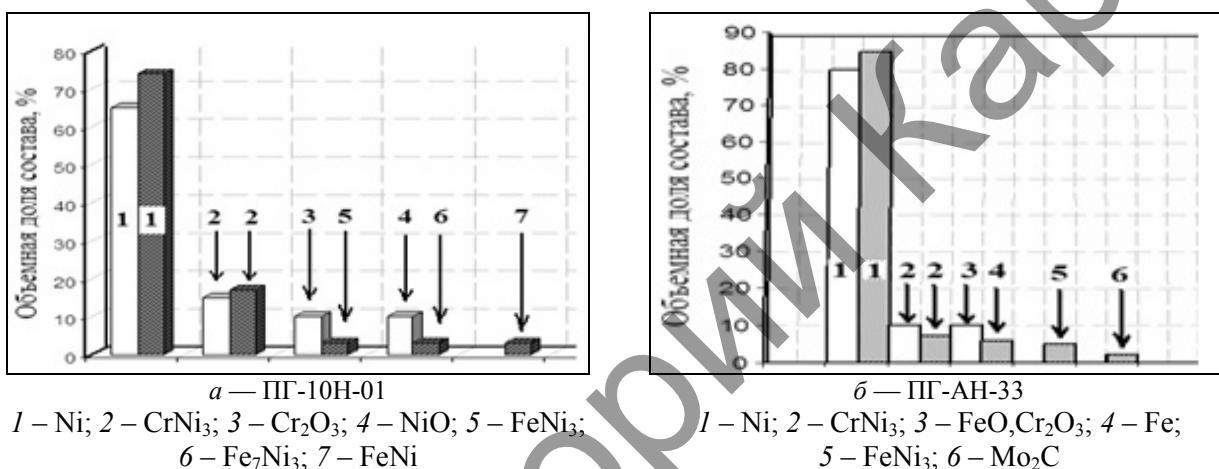


Рисунок 7. Сравнение фазовых составов покрытий из ПГ-10Н-01 и ПГ-АН-33 до (светлые столбики) и после (темные столбики) электронного облучения

В таблице представлены результаты коррозионных испытаний подложки и покрытия из порошка ПГ-10Н-01 до и после электронного облучения.

Т а б л и ц а

Результаты тестов на стойкость к коррозии

Материал	Потенциал коррозии, $\varphi_{корр}$ (мВ)	Ток коррозии, $i_{кор}$ (мА)	Ток пассивации, $i_{пас}$ (мА)	Потенциал пассивации, $\varphi_{пас}$ (мВ)	Скорость коррозии, $v_{корр}$ (мм/г)
Результаты тестов на стойкость к коррозии в 0,5 м H ₂ SO ₄					
Подложка Ст.3	-685	5,70	2,52	1352	3,9
Покрытие из ПГ-10Н-01	-330	0,78	1,1	1035	3,0
Покрытие из ПГ-10Н-01 после обработки электронным пучком	-278	0,59	0,82	984	2,4

Обсуждение результатов эксперимента

Анализируя экспериментальные результаты, можно прийти к заключению, что причиной улучшения эксплуатационных свойств покрытий после электронного облучения служит, во-первых, достигнутое увеличение ширины переходной диффузионной зоны между покрытием и подложкой. Проникновение Ni и Si из облученного покрытия в подложку экспериментально подтверждается (рис. 5),

а по графикам распределения микротвердости по глубине (рис. 3) видно увеличение значений микротвердости в переходном от покрытия к подложке слое, что также подтверждает увеличение ширины диффузионной зоны. Глубина проникновения Ni и Si в подложку составляет величины более 100 мкм (рис. 5).

Во-вторых, микротвердость покрытия увеличивается за счет увеличения суммарной объемной доли интерметаллидных фаз в покрытиях после облучения (рис. 7). Наблюдается заметное увеличение коррозионной стойкости модифицированного покрытия ПГ-10Н-01 (см. табл.), что косвенно свидетельствует об улучшении адгезии покрытия к подложке и согласуется с наблюдаемым ускорением диффузионных процессов при облучении.

В-третьих, формирование достаточно однородной мелкозернистой структуры в облученных покрытиях (рис. 6) свидетельствует о гомогенизации структуры покрытия, что также согласуется с ростом коррозионной стойкости. Таким образом, наблюдается хорошее согласие экспериментальных результатов с предполагаемым на основании модельного эксперимента [10, 11] ускорением диффузионных процессов.

Ожидалось возникновение радиационно-стимулированной диффузии в материалах – поглотителях при облучении, но без экспериментального измерения коэффициентов диффузии судить о вкладе тех или иных факторов в ускорение массопереноса можем только по косвенным признакам. В работе [3] отмечается, что электронное облучение, как правило, приводит к миграции вакансий в облучаемом материале, что может, в свою очередь, приводить к перераспределению растворённых атомов. Также в [3] подчеркивается, что в аустенитных сплавах Fe-Cr-Ni никель менее всех взаимодействует с вакансиями, поэтому им обогащены области вокруг стоков; хром, быстрый диффузонт, мигрирует навстречу вакансионному потоку (т.е. в направлении от стоков); кремний, который прочно связан с межузельными атомами, движется вместе с ними к стокам. Стоками для точечных дефектов, как наблюдалось методами просвечивающей электронной микроскопии [3; 150], являются поры, поверхности, линии дислокаций и дислокационные петли, а также границы зерен. Полагаем, что наблюдаемая по картам фаз картина распределения Ni и Si в подложке на основе Fe и в покрытии после облучения согласуется с описанным явлением миграции Ni и Si к стокам, которыми обогащена зона раздела между покрытием и подложкой. Таким образом, экспериментально наблюдаемое перераспределение элементов покрытия в подложку в результате электронного облучения согласуется с наблюдаемым и теоретически описанным другими авторами явлением радиационно-стимулированной диффузии.

Заключение

Электронное облучение покрытий по рекомендованным режимам приводит к эволюции структурно-фазового состояния покрытий: к увеличению размеров диффузионной зоны между покрытием и подложкой, к увеличению объемной доли упрочняющих интерметаллидных фаз, к формированию достаточно однородной мелкозернистой структуры в облученных покрытиях и, соответственно, к существенному увеличению твердости и износостойкости модифицированных покрытий. Наблюдаемое перераспределение элементов покрытия в подложку свидетельствует об ускорении диффузионных процессов при облучении (предположительно о радиационно-стимулированной диффузии).

Работа выполнена по программе МОН РК 055 «Научная и/или научно-техническая деятельность», подпрограмма 101 «Грантовое финансирование научных исследований».

Список литературы

1. Кадыржанов К.К., Комаров Ф.Ф., Погребняк А.Д., Русаков В.С., Туркебаев Т.Э. Ионно-лучевая и ионно-плазменная модификация материалов. — М.: Изд. МГУ, 2005. — 640 с.
2. Курзина И.А., Козлов Э.В., Шаркеев Ю.П., Фортуна С.В., Конева Н.А., Божко И.А., Калашиников М.П. Нанокристаллические интерметаллидные и нитридные структуры, формирующиеся при ионно-лучевом воздействии // Отв. ред. Н.Н.Коваль. — Томск: НТЛ, 2008. — 324 с.
3. Модифицирование и легирование поверхности лазерными, ионными и электронными пучками / Под ред. Д.М.Поута, Г.Фоти, Д.К.Джекобсона. — М.: Машиностроение, 1987. — 424 с.
4. Погребняк А.Д., Береснев В.М., Азаренков Н.А. Структура и свойства защитных покрытий и модифицированных материалов. — Харьков: Изд. ХНУ, 2007. — 560 с.
5. Фазовые превращения при облучении / Под ред. Ф.В.Нолфи: Пер. с англ. — Челябинск: Metallurgia, 1989. — 311 с.

6 Алонцева Д.Л., Братушка С.Н., Борисенко А.А., Дробышевская А.А., Кулик И.А., Прохоренкова Н.В., Пишк А.В., Рогоз В.Н. Формирование микро- и наноструктурных фаз в покрытиях на основе Ni-Cr и Co-Cr, их структура и свойства // Металлофизика и новейшие технологии. — 2011. — Т. 33. — № 6. — С. 721–745.

7 Алонцева Д.Л., Братушка С.Н. и др. Формирование стабильных наноструктурных фаз в Ni-Cr порошковых покрытиях в результате воздействия плазменной струи // Физика металлов и металловедение. — 2012. — Т. 113. — № 8. — С. 827–836.

8 Alontseva D., Missevra S., Russakova A.V. Characteristics of Structure and Properties of Plasma-Detonated Ni-Cr and Co-Cr Based Powder Alloys Coatings // Journal of Materials Science and Engineering. — 2013. — Vol. 3. — № 1A. — P. 41–49.

9 Алонцева Д.Л., Иванов С.А., Погребняк А.Д., Русакова А.В., Прохоренкова Н.В. Плазменно-детонационные покрытия на основе Ni-Cr и Co-Cr I. Структура, прочность и модель строения // Деформация и разрушение материалов. — 2012. — № 8. — С. 14–20.

10 Алонцева Д.Л., Красавин А.Л., Погребняк А.Д., Рахметуллина С.Ж., Русакова А.В. Модификация электронным облучением структурно-фазового состояния и свойств плазменно-детонационных покрытий на основе Ni-Cr // Перспективные материалы. — 2013. — № 1. — С. 5–12.

11 Alontseva D.L., Krasavin A.L. Computer Simulation of Temperature Profiles of a Two-Layer Sample During Heating by the Electron Beam // The Kazakh-American Free University Academic Journal. — 2013. — J 38, USA, Oregon, — P. 252–257.

Д.Л.Алонцева, Н.В.Прохоренкова

Болат төсеніштерге плазмалық ағынмен қондырылған ұнтақтық жабындының құрылымдық-фазалық күйі мен қасиеттерін сәулелендірумен модификациялау

Мақалада эксплуатациялық қасиеттерін (қаттылық, тозуға және коррозияға төзімділік) модификациялауда практикалық ұсыныстар жасау мақсатында Ni-Cr негізіндегі ұнтақтық қорғаныш жабындының құрылымдық-фазалық күйі мен қасиеттеріне электрондық сәулеленудің әсерлерінің жалпы заңдылықтарын зерттеу нәтижелері қарастырылған. Трансмиссиялық және растрлық микроскопия, атомдық-күштік микроскопия, рентгенқұрылымдық-фазалық талдаудың эксперименттік мәліметтерінің негізінде болат төсеніштерге жоғары жылдамдықты плазма ағынымен қондырылған қалың (300 мкм-ге дейін) ұнтақтық төсеніштердің ескеру моделі жасалған.

D.L.Alontseva, N.V.Prokhorenkova

Modification by irradiation of structural phase states and properties of powder coating deposited on a steel substrate by plasma jet

The paper discusses the results of an investigation the general regularities of electron beam irradiation on the structural-phase state and the properties of protective powder Ni-Cr based coatings in order to develop practical recommendations for the modification of their operational properties (hardness, wear resistance, corrosion resistance) by irradiation. Based on the experimental data transmission and scanning electron microscopy, atomic force microscopy and X-ray phase analysis developed the structure model of thick (300 micron) powder coatings deposited by high velocity plasma jet on steel substrate.

References

- 1 Kadyrzhanov K.K., Komarov F.F., Pogrebnyak A.D., Russakov V.S., Turkebaev T.E. *Ion-beam and Ion-plasma Modification of Materials*, Moscow, MGU, 2005.
- 2 Kurzina I.A., Kozlov E.V., Sharkeev Y.P., Fortuna S.V., Koneva N.A., Bozhko I.A., Kalashnikov M.P. *Nanocrystalline intermetallic and nitride structures formed by ion-beam exposure* // Ans. Ed. N.N.Koval, Tomsk: NTL, 2008, p. 324.
- 3 Poate J.M., Foti G., Jacobson D.C. *Surface Modification and Alloying by Laser, Ion and Electron Beams*. N.Y., 1983, p. 424.
- 4 Pogrebnyak V.S., Beresnev V.M., Azarenkov N.A. *Structure and the properties of protective coatings and modified materials*, Kharkov: Publ. KNU, 2007, p. 560.
- 5 Nolfi F.V. *Phase Transformation during Irradiation*, Chelyabinsk: Metallurgiya, 1989, p. 311.
- 6 Alontseva D.L., Bratushka S.N., Borysenko A.A., Prokhorenkova N.V., Shablya V.T. *Formation of Micro- and Nanostructured Phases in Coatings Based on Ni-Cr and Co-Cr*, Their Structure and Properties, *Металлофизика I Noveishie Tekhnologii*, 2011, 33, p. 721–745.
- 7 Alontseva D.L., Bratushka S.N., Iljashenko M.V., Mahmudov N.A., Prokhorenkova N.V. et al. *Formation of stable nanostructured phase in plasma-jet-treated Ni-Cr powder coatings* // *The Physics of Metals and Metallography*, 2012, vol. 113, No. 8, p. 827–836.
- 8 Alontseva D., Missevra S., Russakova A.V. *Characteristics of Structure and Properties of Plasma-Detonated Ni-Cr and Co-Cr Based Powder Alloys Coatings* // *Journal of Materials Science and Engineering*, 2013, vol. 3, No. 1A, p. 41–49.

9 Alontseva D.L., Ivanov S.A., Pogrebniak A.D., Russakova A.V., Prokhorenkova N.V. *Structural-phase state and structure model of Ni-Cr and Co-Cr based powder coatings deposited by plasma detonation on a steel substrate* // Deformation and fracture of materials, 2012, No. 8, p. 14–20.

10 Alontseva D.L., Krasavin A.L., Pogrebniak A.D., Rakhmetullina S.Z., Russakova A.V. *Modification of a structure-phase composition and properties of plasma detonation coatings by e-beam irradiation* // Journal of Advanced Materials, 2013, No. 1, p. 5–12.

11 Alontseva D.L., Krasavin A.L. *Computer Simulation of Temperature Profiles of a Two-Layer Sample During Heating by the Electron Beam* // The Kazakh-American Free University Academic Journal, J 38, USA, Oregon, 2013, p. 252–257.

УДК 538.911

И.А.Дёмина¹, Г.В.Попова¹, М.Д.Старостенков²

¹Восточно-Казахстанский государственный университет им. С.Аманжолова, Усть-Каменогорск;

²Алтайский государственный технический университет им. И.И.Ползунова,
Барнаул, Россия (E-mail: irdyomina@mail.ru)

Влияние комплексов точечных дефектов на процесс разупорядочения сплава Cu_3Au

Статья посвящена исследованию методом молекулярной динамики вклада комплексов точечных дефектов в процесс разупорядочения сплава Cu_3Au , а также изучению стадий образования комплексов, состоящих из двух вакансий, в зависимости от расстояния между ними, предельной температуры их существования и влияния давления всестороннего сжатия и растяжения на температурные области их устойчивости. Выявлены температурные интервалы образования комплексов и их существование. Показано, что температура распада комплексов зависит от их состава.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, комплексы точечных дефектов, вакансии, дивакансионные комплексы, межузельные атомы, процесс разупорядочения, давление всестороннего сжатия, давление всестороннего растяжения.

Известно, что к точечным дефектам относятся различные ассоциации или комплексы точечных дефектов [1–3]. Число возможных комплексов очень велико, а вероятность их образования тем больше, чем больше концентрация простых дефектов и чем больше вероятность их встреч. Образовавшиеся комплексы в большинстве случаев обладают свойствами, отличными от свойств образующих их простых дефектов. При высоких температурах, когда равновесная концентрация достаточно велика, одиночные вакансии могут образовывать вакансионные комплексы типа ди-, тривакансии в зависимости от энергии их связи. Ранее особенности процесса разупорядочения сплава Cu_3Au в зависимости от концентрации вакансий и температуры были рассмотрены в работе [4]. В настоящей работе методом молекулярной динамики изучены стадии образования комплексов, состоящих из двух вакансий, в зависимости от расстояния между ними, предельной температуры их существования и их вклад в процесс разупорядочения сплава Cu_3Au , в зависимости от температуры, и влияние давления всестороннего сжатия и растяжения на температурные области их устойчивости.

В качестве объекта исследования был взят двумерный кристалл сплава Cu_3Au , соответствующий упаковке атомов плоскости $\{111\}$ ГЦК-решётки сверхструктуры $L1_2$. Расчетный блок кристалла представлялся содержащим 1600 атомов, за пределами блока структура повторялась с помощью периодических граничных условий. Кристалл импульсно разогревался от 0 К до определенной температуры, выдерживался при этой температуре в течение 50 пс компьютерного времени, а затем охлаждался. Всего конфигураций в интервале расстояний между парами вакансий до пятого соседства десять. На более далёких расстояниях эффекты взаимодействия между парами вакансий оказываются незначительными и поэтому не рассматриваются. Эксперименты проводились с использованием программы [5].

В результате исследований было установлено, что для двумерного кристалла упорядоченного сплава Cu_3Au объединение пары вакансий в комплекс и его трансформация в тривакансию и межузельный атом происходит в интервалах температур от 10 до 300К в зависимости от расстояния между