

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

1

DOI: 10.17223/9785946217408/135

ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ НАНОКРИСТАЛЛОВ МАГНИЯ [0001]
И $[1\bar{1}01]$ -ОРИЕНТИРОВОК

^{1,2}Власова А.М.

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург

²Уральский федеральный университет
имени Первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург

Пластическая деформация – неоднородный процесс, хотя на макроуровне, за счет усреднения по большому числу частиц, неоднородность оказывается замаскированной и уходит на второй план. Однако именно неоднородность является фундаментальной характеристикой деформации, без которой невозможно верное объяснение сложных деформационных процессов. Неоднородность деформации, обусловленная различными микроскопическими механизмами, хорошо поддается изучению в процессе моделирования, в частности методами молекулярной динамики. В данной работе рассматривается моделирование высокоскоростного пластического течения ($\nu = 3 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$) нанокристаллов магния двух различных ориентировок. Такая скорость, либо ниже, может быть достигнута на реальных образцах в процессе сварки взрывом, или ударно-волнового нагружения.

Субмелкокристаллическая и нанокристаллическая структура магния и его сплавов содержит хаотично распределенные кристаллиты, среди которых находятся кристаллиты ориентировок $[1\bar{1}01]$ и $[0001]$. Эти две ориентировки интересны тем, что нанокристаллы $[0001]$ ориентировки имеют самое высокое значение условного предела текучести, и самую низкую пластичность среди всех возможных ориентировок, и нанокристаллы $[1\bar{1}01]$ ориентировки, напротив, имеют самое низкое значение предела текучести, и самую высокую пластичность. Условный предел текучести $[0001]$ -монокристаллов составляет $\sigma_{0,2}^{[0001]} = 102 \text{ МПа}$, относительное удлинение принимает значение $\delta^{[0001]} = 5\%$, для $[1\bar{1}01]$ -монокристаллов $\sigma_{0,2}^{[1\bar{1}01]} = 2,7 \text{ МПа}$, $\delta^{[1\bar{1}01]} > 12\%$ для низких скоростей деформации. В данной работе проведено атомистическое моделирование деформации сжатием идеальных $[0001]$ - и $[1\bar{1}01]$ -монокристаллов магния при $T = 300\text{--}400 \text{ К}$.

Моделирование проводилось с использованием вычислительного пакета LAMMPS. Потенциал межатомного взаимодействия взят из работы [1].

Моделируемые ячейки были выбраны в форме прямоугольных параллелепипедов размерами $9.7 \times 22.1 \times 41.4 \text{ нм}$, ребрам которой соответствовали кристаллографические направления $\mathbf{X} = [1\bar{1}20]$, $\mathbf{Y} = [1101]$, $\mathbf{Z} = [110\bar{1}]$ (ориентировка $[1\bar{1}01]$), и размерами $19.1 \times 22.1 \times 31.2 \text{ нм}$, ребрам которой соответствовали кристаллографические направления $\mathbf{X} = [1100]$, $\mathbf{Y} = [11\bar{2}0]$, $\mathbf{Z} = [0001]$ (ориентировка $[0001]$).

Одноосное сжатие осуществлялось путем переопределения скоростей атомов, находящихся в приповерхностных торцевых слоях толщиной $0,52 \text{ нм}$, $0,62 \text{ нм}$, что суммарно составило около $1,7\%$, $1,5\%$. Этим задавалось одноосное сжатие образца вдоль кристаллографической оси Z с постоянной скоростью 10 м/с .

Построены расчетные кривые напряжение-деформация для указанных ориентировок (рис.1а). Характер кривых имеет общие черты. Линейный рост напряжения при низких степенях деформации (до $\epsilon = 0,05\text{--}0,06$) скачком выходит на плато. Средние напряжения деформации при этом отличаются от максимального на порядок для $[0001]$ -нанокристаллов

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

и на два порядка для $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов. Показано, что зарождение и скольжение дислокаций протекает при более высоких напряжениях для $[0001]$ -нанокристаллов чем для $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов. Скорость в процессе деформации нанокристаллов $[1\bar{1}01]$ -ориентировки практически постоянна и равна $\dot{\varepsilon} \approx 3 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$, имеется несколько аномальных скачков, для $[0001]$ -ориентировки скорость принимает значения в широком диапазоне $0 < \dot{\varepsilon} < 4 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$. Делается вывод, что роль междислокационного взаимодействия в процессе деформирования велика для $[0001]$ -нанокристаллов, для $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов незначительна.

Рассчитано изменение дислокационной плотности в процессе деформации (рис.1б). Показано, что в случае $[0001]$ - и $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов магния накопление дислокаций, в соответствии с экспериментальными данными для любых деформированных металлов, не превышает плотности в $10^{12} - 10^{13} \frac{1}{\text{см}^2}$. Однако для $[0001]$ -нанокристаллов происходит монотонное накопление дислокаций в объеме, в то время как для $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов происходит накопление и сброс дислокаций, что позволяет поддерживать уровень дислокационной плотности на постоянном уровне $\rho = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

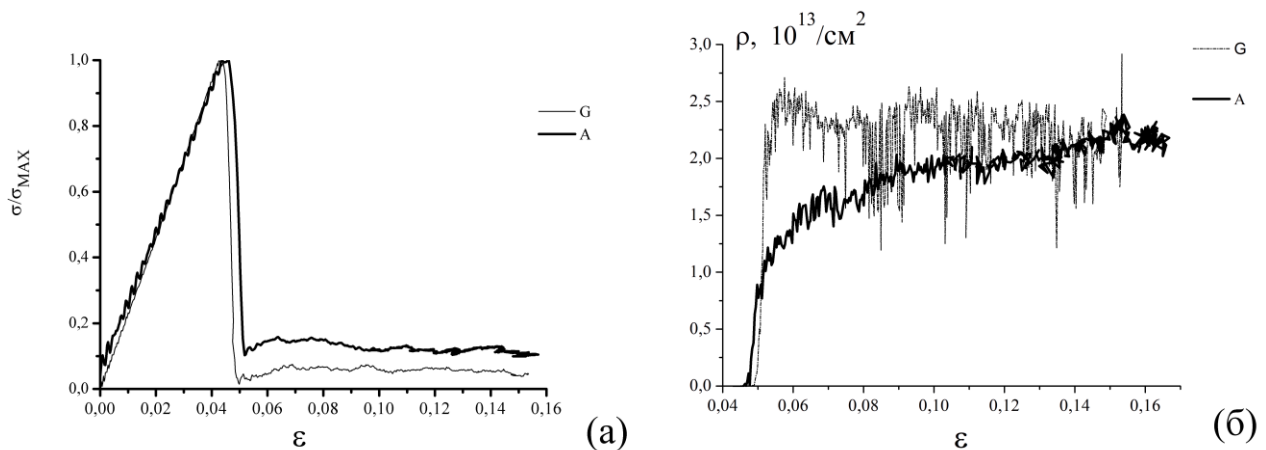


Рис. 1

(а) Диаграмма напряжение-деформация (в относительных единицах), (б) изменение плотности дислокаций в процессе деформирования

(G)- $[1\bar{1}01]$ -ориентировка, (A) - $[0001]$ -ориентировка.

Литература

1. D. Y. Sun, M. I. Mendeleev, C. A. Becker, K. Kudin, Tomorr Nahhimali, M. Asta, J. J. Hoyt, A. Karma, and D. J. Srolovitz Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals: A molecular dynamics study of Mg. Phys. Rev. B 73, 024116 (2006).

Расчеты проводились на суперкомпьютере «Уран» ИММ УрО РАН.

Автор благодарит Российский фонд фундаментальных исследований за финансовую поддержку (грант № 16-33-60027 мол_a_дк).