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

DOI: 10.17223/9785946217408/144

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ МИКРОПОР КАК МЕХАНИЗМА РАЗВИТИЯ
МИКРОПОВРЕЖДЕНИЙ: АТОМИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД**

Герасимов Р.М., Волегов П.С.

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

Вопросы разрушения металлов и их сплавов в ходе процессов деформирования остаются актуальными ввиду повсеместного использования металлических соединений в технике и технологии. Известно, что конструкционные металлические материалы в большинстве случаев имеют поликристаллическую структуру, а их поведение обусловлено внутренней структурой поликристалла, под которой понимается ее морфология, а также совокупность ансамблей различных дефектов и дефектных структур. В современной физике твердого тела в качестве носителей механизма поврежденности принято рассматривать микротрещины и микропоры, возникающие в процессах деформирования и фазовых переходов материала.

В ходе работы построена и численно реализована математическая модель, описывающая поведение микропор в ходе внешних температурных и силовых воздействий. Для моделирования использовался метод молекулярной динамики, который заключается в представлении исследуемого объекта в виде совокупности взаимодействующих частиц (атомов). Недостатком такого подхода к моделированию на сегодняшний день является невозможность построения моделей реальных технологических процессов ввиду недостаточных вычислительных мощностей, однако, метод успешно применяется для теоретических исследований эволюции внутренней структуры материалов на уровне наномасштабов и ансамблей дефектов [1].

В качестве ключевого аспекта атомистического подхода выступает потенциал межатомного взаимодействия, описывающий зависимость энергии взаимодействия частиц от их взаимного расположения. Выбор потенциала взаимодействия и способа его построения зависит от множества факторов; в первую очередь – от механизмов, которые следует описать в рамках численного эксперимента. В рамках работы в качестве подхода к построению потенциала межатомного взаимодействия выбрана модель погруженного атома (*EAM – embedded atom model*) [2]. Несомненным преимуществом EAM является учет взаимодействия отдельной частицы с электронным облаком, что является немаловажным фактором при моделировании металлических соединений, которые являются яркими представителями плотноупакованных систем. Отметим, что подход EAM в последние годы зарекомендовал себя как при моделировании однокомпонентных, так и многокомпонентных систем [3].

Построенная в рамках работы модель использована при проведении ряда численных экспериментов для нахождения устойчивой конфигурации микропоры минимального размера в высокоуглеродистой стали Fe-C (содержание углерода около 0.8%). Используемый потенциал межатомного взаимодействия приведен в работе [4]. Отдельно решена задача генерации начальных условий: сгенерированная ОЦК структура Fe-C (распределение углерода осуществлялось равномерно по всему объему) выдерживалась при постоянной температуре $T = 300\text{ K}$ для получения равновесной конфигурации. Следующим шагом при моделировании являлась генерация микропоры путем извлечения атомов, содержащихся в некотором объеме сферической формы. В работе подразумевается, что объем поры занят вакуумом, однако отметим, что в общем случае это не так, поскольку порообразование в металлах происходит, как правило, в ходе процессов, при которых происходит добавление вторичных веществ (например, аргона при сварке). Сферическая форма микропоры выбрана из соображений, что устойчивой является такая конфигурация, которая имеет минимальную поверхностную площадь.

Под устойчивостью конфигурации поры понимается существование объема, отделенного от частиц искомой системы некоторой поверхностью раздела в течение времени, превышающего время релаксации системы. В ходе численных экспериментов было показано,

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

что минимальный радиус поры, устойчивой при $T = 300\text{ K}$ (в отсутствие внешних воздействий), составляет $4.2\text{ \AA}$, однако при увеличении температуры системы до 600 K и выше в объеме происходит «зарастание» поры. Дальнейшие эксперименты показали, что устойчивой по отношению к температуре (до $T = 1000\text{ K}$), а также деформациям (до 0.7%) являются поры, радиус которых составляет $5.1\text{ \AA}$ и больше.

Анализ полученной в ходе расчетов структуры и выделение дефектных областей (микропоры) выполнялся с помощью известных методов структурного анализа [5]: параметра центральной симметрии (*central symmetry parameter, CSP*) и анализа общего соседства (*common neighbourhood parameter, CNP*). Полученные результаты показали, что использование параметра центральной симметрии для стали является малоэффективным; это связано с тем, что параметр центральной симметрии относит к дефектным области, расположенные вблизи примесных атомов углерода (рис. 1а). При использовании параметра общего соседства подобных проблем не возникает (рис. 1б) и с помощью такого параметра удастся достаточно точно выделить поверхность поры (атомы вблизи поверхности) (рис. 1в). Отраженные результаты показывают, что предложенная модель является пригодной для моделирования пор и их взаимодействия со средой в рамках температурных и деформационных процессах, а также для описания взаимодействия микропор с дислокациями.

Рис. 1. Результаты анализа дефектной структуры расчетной области с помощью параметра центральной симметрии (а), параметра общего соседства (б), а также выделенная с помощью параметра общего соседства поверхность микропоры (в)

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ № МК-1298.2017.1.

Литература

1. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation, Second Edition. – Cambridge: University Press, 2004. – 551 p.
2. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Physical Review B. — 1984. — Vol. 29, Is. 12. — Pp. 6443-6453.
3. Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 1: Потенциалы для однокомпонентных систем // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2017. – № 4. – С. 214–237
4. Hepburn D.J., Ackland G.J. Metallic-covalent interatomic potential for carbon in iron // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 78, Is. 16. – 165115.
5. Tsuzuki H., Branicio P., Rino J.P. Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood // Computer Physics Communications. – 2007. – Vol. 177, Is. 5 – Pp. 518 – 523.