ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

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

Х МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «Химия нефти и газа»

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

DOI: 10.17223/9785946217408/151

ФОРМИРОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ НА АТОМНОМ УРОВНЕ ПРИ МЕХАНИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ CoCrFeMnNi

Корчуганов А.В.

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

Одним из наиболее актуальных объектов исследования в области материаловедения являются высокоэнтропийные сплавы (ВЭС), вследствие их превосходных физикомеханических свойств. Это сплавы, содержащие от пяти и более химических элементов, как правило смешанных примерно в равных долях. В настоящее время активно решаются задачи по улучшению свойств ВЭС при отклонении от эквиатомного состава.

В данной работе в рамках метода молекулярной динамики изучены механизмы зарождения пластичности при сжатии и растяжении кристаллитов ВЭС CoCrFeMnNi различного стехиометрического состава. Распределение химических элементов в сплавах соответствовало минимальному значению полной энергии системы для заданного стехиометрического состава и было получено в результате релаксации образцов методами Монте-Карло и молекулярной динамики. Моделировались монокристаллические объемные образцы (с периодическими граничными условиями во всех направлениях) и образцы в виде тонких пленок. Как показали расчеты, модуль Юнга сплавов CoCrFeMnNi увеличивается при повешении содержания Со и Ni или при уменьшении содержания Сr, Fe и Mn. Исходя из этого, для исследования влияния стехиометрии ВЭС на механизмы пластической деформации были выбраны два стехиометрических состава: Co₃₀Cr₃₀Fe₁₀Mn₁₀Ni₂₀ и Co₁₀Cr₁₀Fe₃₀Mn₃₀Ni₂₀, с большим и малым модулем Юнга, соответственно.

Особенности зарождения и развития пластичности существенно отличаются для рассмотренных стехиометрических составов ВЭС. Для монокристаллов обоих составов в плоскостях $\{111\}$ формируются дефекты упаковки вычитания и полосы со структурой ГПУ решетки. Однако их зарождение и рост более интенсивно происходят в $Co_{10}Cr_{10}Fe_{30}Mn_{30}Ni_{20}$, при этом напряжения при достижении предела упругости в два раза меньше, чем у $Co_{30}Cr_{30}Fe_{10}Mn_{10}Ni_{20}$. При дальнейшем растяжении образцов в образцах формируются двойники, а при сжатии они не наблюдаются. Двойникование более выражено в образцах в виде тонких пленок.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект N 17-79-10108).