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: 10.17223/9785946217408/125

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ
ПЛАСТИЧЕСКОГО ОТТЕСНЕНИЯ МАТЕРИАЛА ПРИ СКРЕТЧ ТЕСТИРОВАНИИ
ПОЛИКРИСТАЛЛА ТИТАНА**

^{1,2}Дмитриев А.И., ^{1,2}Никонов А.Ю., ¹Шугуров А.Р.

¹*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия*

²*Томский государственный университет, Томск, Россия*

Скретч-тестирование поверхности твердым инструментом на сегодняшний день наряду с индентированием является основным способом исследования механического поведения поверхностного слоя материала. Как показывает анализ опубликованных экспериментальных исследований, посвященных скретч-тестированию поликристаллических твердых тел, основное внимание на сегодняшний день уделяется изучению пластического оттеснения материала движущимся индентором, оценке твердости, определению коэффициента трения и других характеристик образцов. В то же время влияние микроструктуры материалов на их износостойкость и механизмы образования навалов, по-прежнему, остается недостаточно исследованным. В настоящей работе с использованием метода молекулярной динамики изучается процесс зарождения и развития пластической деформации при моделировании тангенциального движения жесткого индентора в наноразмерном титановом поликристалле. Установлено, что различный характер пластической деформации в процессе царапания индентором определяется различием кристаллографических ориентаций отдельных зерен, что в свою очередь определяется реализацией тех или иных дислокационных систем скольжения. В работе подробно исследованы закономерности перераспределения избыточного удельного атомного объема и развитие дислокационной структуры в зависимости от кристаллографической ориентации отдельных зерен. Проанализированы особенности пластического оттеснения материала при прохождении индентора через межзеренные границы и плоскости двойников. Результаты исследований показывают хорошее качественное и, в некоторых характеристиках, количественное соответствие результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными по скретч-тестированию поликристаллических титановых образцов. На основе полученных данных, а также результатов экспериментальных исследований процессов локального массопереноса, развивающихся в поликристаллах α -Ti при скретч-тестировании, предложена модель, позволяющая связать наблюдаемые закономерности пластического оттеснения материала с деформационным упрочнением зерен с определенными кристаллографическими ориентациями.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 18-48-700009.