ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

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

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/115

**ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЙ ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ В
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ Ni ПРИ СДВИГОВОМ НАГРУЖЕНИИ**

Крыжевич Д.С., Корчуганов А.В., Зольников К.П.

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

Повышенное внимание к нанокристаллическим и наноразмерным материалам обусловлено их высокими прочностными и функциональными свойствами и возможностью миниатюризации устройств различного рода в электронике, медицине, робототехнике и т.д. Нанокристаллические металлические материалы уже сейчас имеют широкое практическое применение. При низких температурах они характеризуются высокой прочностью, вследствие зернограницного упрочнения (эффект Холла – Петча). При высоких температурах нанокристаллические материалы обладают сверхпластичностью благодаря зернограницному разупрочнению, что значительно облегчает технологические процессы. Из-за достаточно большого барьера Пайерлса дислокационное скольжение в нанокристаллических металлах существенно подавляется. В то же время усиливается роль различных мод зернограницной деформации или двойникования. Одновременно с зернограницным скольжением в нанокристаллических материалах развиваются аккомодационные процессы, которые трансформируют возникшие дефекты и понижают в их области напряжения, повышая тем самым пластичность материала. Поэтому изучению природы аккомодационных процессов в нанокристаллических материалах уделяется большое внимание. Эмиссия решеточных дислокаций из зоны тройных стыков, диффузия, ротационная деформация, расщепление и миграция границ зерен являются типичными примерами аккомодационных механизмов. Миграция и расщепление границ зерен, инициированные зернограницным скольжением, часто реализуются в виде коллективного механизма и существенно повышают эффективность аккомодационного процесса. В настоящей работе проведено молекулярно-динамическое изучение механизмов зарождения и развития пластичности в нанокристаллическом Ni в условиях высокоскоростного деформирования.

Поставленная задача решалась в рамках молекулярно-динамического подхода с использованием программного пакета LAMMPS. Расчеты были выполнены применительно к нанокристаллическому образцу Ni, состоящему из 9 зерен примерно одинакового размера с большими углами разориентации друг относительно друга. В одном из направлений образца моделировались жесткие захваты, к которым прикладывались сжимающие силы и сдвиг с постоянной скоростью. В двух других направлениях использовались периодические граничные условия. Моделируемый образец имел форму параллелепипеда и содержал около 1 млн. атомов (Рис. 1).

Рис. 1. Исходная структура образца и схема нагружения. F – прижимающая сила, V – скорость сдвига захвата

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Межатомное взаимодействие описывалось многочастичным потенциалом, рассчитанным в рамках метода погруженного атома. Начальная температура образца составляла 300К. Жесткие захваты смещались со скоростью V 5 м/с в противоположных направлениях. Прижимающая сила F , действующая на каждый захват, составляла 0.01 eV/Å. Анализ структуры осуществлялся с помощью алгоритма анализа по общим соседям. Визуализация результатов расчетов проводилась на основе графического пакета OVITO.

Результаты моделирования показывают, что зарождение пластичности в нанокристаллическом образце Ni начинается с формирования дефекта упаковки в области одного из тройных стыков зерен. При этом, одна из границ зерен, примыкающая к тройному стыку, испытывает растягивающие напряжения, а другая сжимающие. Такое перераспределение напряжений благоприятствует зарождению дефектов упаковки, по разные стороны которых всегда реализуются разноименные внутренние напряжения. По мере нагружения зародившийся дефект упаковки прорастает в тело одного из зерен. Отметим, что одновременно с генерацией дефектов упаковки в образце происходит нарастание числа атомов с ГПУ и неопределенной типом структуры ближайшего окружения. Зарождение дефектов упаковки является первым из реализующихся механизмов аккомодации образца на нагружение. При его исчерпании включается следующий аккомодационный механизм, связанный с миграцией границ зерен, что приводит к существенному перераспределению размера зерен.

Исследования были проведены в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы (Приоритетное направление III.23).