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: 10.17223/9785946218412/148

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО НАГРУЖЕНИЯ $[1\bar{1}01]$ -
МОНОКРИСТАЛЛОВ МАГНИЯ

^{1,2}Власова А.М.

¹Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

²Уральский федеральный университет им. Б.Н.Ельцина, Екатеринбург

Для исследования была выбрана $[1\bar{1}01]$ -ориентировка монокристаллов магния с осью под 45° к оси симметрии шестого порядка с преимущественным базисным скольжением S_b , для которого фактор Шмида принимает максимальное значение равное 0.5 [1,2], критическое напряжение сдвига составляет 0,7 МПа [3]. Экспериментально эта ориентировка, наряду с другими, была впервые рассмотрена в ставшей классической работе [1], в которой построены деформационные кривые для низких скоростей деформации ($\nu = 30 \text{ с}^{-1}$) и обсуждаются возможные моды и механизмы пластической деформации. Ранее молекулярно-динамических расчетов по изучению деформационного поведения $[1\bar{1}01]$ монокристаллов не проводилось.

Моделирование выполнено с использованием вычислительного пакета LAMMPS [4], обработка расчетных данных выполнена при помощи Open Visualization Tools OVITO [5]. Моделируемая ячейка размером $9.7 \times 22.1 \times 41.4$ нм была выбрана в форме прямоугольного параллелепипеда, ребрам которого соответствовали кристаллографические направления $\mathbf{X} = [\bar{1}\bar{1}20]$, $\mathbf{Y} = [\bar{1}101]$, $\mathbf{Z} = [\bar{1}10\bar{1}]$. Одноосное сжатие осуществлялось путем переопределения скоростей атомов, находящихся в приповерхностных торцевых слоях толщиной 0.62 нм.

Модуль мгновенной скорости $|\dot{\epsilon}_i|$ рассчитывался как

$$|\dot{\epsilon}_i| = \left| \frac{l_i - l_{i+1}}{\Delta \tau \cdot l_0} \right| \quad (1)$$

Временная зависимость (зависимость от степени деформации) скорости деформации является показателем, позволяющим выявить неоднородность деформационных процессов. С одной стороны, скорость является той макроскопической характеристикой, которую легко измерить, которая характеризует монолитный образец. С другой стороны, изменение скорости от одного момента времени к другому, при постоянном внешнем усилии, указывает на неоднородность пластического течения.

На рис. 1а показана зависимость скорости $\dot{\epsilon}$ деформации от степени деформации ϵ (для удобства здесь и далее зависимость от времени τ заменена на зависимость от степени деформации ϵ).

Видно, что скорость $\dot{\epsilon} \approx 2.5 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ постоянна при $\epsilon < 0.05$. При $\epsilon > 0.05$ характер кривой становится неустойчивым. На кривой можно наблюдать аномальные скачки, максимальный из которых соответствует скорости деформации в 7 раз превосходящей среднюю скорость. До момента зарождения дислокаций были достигнуты значительные сдвиговые напряжения, которые обеспечили разгон дислокаций до больших скоростей. Если скорость пластической деформации за счет движения дислокаций значительно превышает скорость внешней (заданной) деформации, с которой производится сжатие, скорость деформации может оказаться отрицательной. Модуль скорости принимает значения в интервале $0 < \dot{\epsilon} < 1.4 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$. На рис. 1б показано изменение нормированной потенциальной энергии $\frac{E}{E_{\max}}$ системы атомов в зависимости от степени деформации ϵ . Локальный максимум при $\epsilon = 0.05$ соответствует достижению критического напряжения для зарождения дислокаций.

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

При $0.05 < \epsilon < 0.06$ монотонная убыль потенциальной энергии соответствует зарождению дислокаций. При $\epsilon > 0.06$ слабый монотонный рост свидетельствует о скольжении дислокаций. При $\epsilon > 0.1$ кривая принимает характерную пилообразную форму с горизонтальной компонентой зубчатости (врезка на рис. 1б), что связано с междислокационным взаимодействием.

Рис. 1. Модуль скорости деформации в процессе деформирования (а) и соответствующее изменение потенциальной энергии (б)

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме “Давление” № АААА-А18-118020190104-3.

Расчеты проводились на суперкомпьютере ИММ УрО РАН «УРАН».

1. Robson J. Anisotropy and Asymmetry of Yield in Magnesium Alloys at Room Temperature // Metallurgical and materials transactions A. 2014. V. 45. P. 5226-5235.
2. Kelly E.W., Hosford W.F. Plane strain compression of magnesium and magnesium alloy crystals // Trans. AIME. 1968. V. 242. P. 5-13.
3. Zhang J. Joshi S.P. Phenomenological Crystal Plasticity Modeling and Detailed Micromechanical Investigations of Pure Magnesium // J. Mech. Phys. Solids. 2012. V. 60. No. 5. P. 945-972.
4. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. P. 1.
5. Stukowski A. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. V. 18. 2010. P. 015012.