ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии»,

посвященная 90-летию со дня рождения
основателя и первого директора ИФПМ СО РАН
академика Виктора Евгеньевича Панина

в рамках
Международного междисциплинарного симпозиума
«Иерархические материалы: разработка и приложения
для новых технологий и надежных конструкций»

5–9 октября 2020 года
Томск, Россия

Томск
Издательство ТГУ
2020

DOI: 10.17223/9785946219242/120

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ АНИЗОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Никонов А.Ю., Дмитриев А.И.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

В последние десятилетия аддитивные технологии получили широкое распространение в промышленности не только на этапе прототипирования, но и при серийном производстве. Одной из основных проблем при получении новых сплавов при использовании аддитивных технологий является оптимизация микроструктуры, которая оказывает существенное влияние на механические свойства. Эти свойства напрямую связаны с качествами полученных изделий. Поэтому получение материалов с требуемой структурой при аддитивных технологиях является актуальной задачей. Известно, что в процессе создания изделий в материале может формироваться дендритная структура, которая приводит к появлению анизотропии свойств и, следовательно, ухудшению эксплуатационных характеристик изделий. Периодическая механическая обработка поверхности наплавленного слоя способствует дроблению кристаллита на субзерна. Исследование этих процессов с анализом влияния кристаллографической ориентации формирующихся кристаллитов является важным для определения параметров технологического процесса промежуточной обработки. Компьютерное моделирование в рамках метода молекулярной динамики позволяет изучить структурные перестройки в объёме образца в ходе зарождения и развития пластической деформации. Таким образом, целью работы было изучение поведения на атомном масштабе анизотропного материала на примере монокристалла меди в условиях одноосного сжатия.

Моделирование в рамках молекулярной динамики проводились с использованием программного пакета LAMMPS [1]. В качестве объекта исследования были выбраны монокристаллы меди размерами 30a×60a×30a и 30a×30a×30a, где a – параметр решётки, вдоль направлений X, Y, и Z лабораторной системы координат. Сжатие проводилось с постоянной скоростью вдоль оси Y. В задачах варьировалась ориентация кристаллической решётки относительно направления сжатия и свободных поверхностей.

В работе анализировалось образование дефектов структуры в объёме образца на различных этапах нагружения. Кроме того, проводилось сравнение полученной картины сдвига в образцах с экспериментально наблюдаемым деформационным рельефом поверхности [2]. Полученные результаты могут быть использованы при прогнозировании формоизменения образцов и фрагментации кристаллов в результате сдвиговой деформации в зависимости от кристаллографической ориентации нагрузки. Последнее важно для рассмотрения роста кристаллов при последующей наплавке на предварительно сформированные слои.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 гг. (Проект III.23.2.4) и РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта № 18-48-700009.

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. – 1995. – Vol. 117. – No. 1. – P. 1-19.
2. Alfyorova E.A., Lychagin D.V. Self-Organization of Plastic Deformation and Deformation Relief in FCC Single Crystals // Mechanics of Materials. – 2018. – V. 117. – P. 202-213.