

# ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

## МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«Физическая мезомеханика.

Материалы с многоуровневой иерархически  
организованной структурой и интеллектуальные  
производственные технологии»

6–10 сентября 2021 г.

Томск, Россия

DOI: 10.17223/978-5-907442-03-0-2021-366

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ  $\alpha$ -Ti  
В УСЛОВИЯХ, ИМИТИРУЮЩИХ УЛЬТРАЗВУКОВУЮ УДАРНУЮ ОБРАБОТКУ**

Никонов А.Ю., Дмитриев А.И.

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск*

Ультразвуковая ударная обработка (УЗО) – это метод обработки, при котором происходит ударное деформирование поверхности материала на ультразвуковой частоте. В результате в поверхностном слое наблюдается заметное изменение микроструктуры за счёт измельчения существующих зёрен и образования новых. УЗО способствует целому комплексу процессов, протекающих в поверхностном слое: увеличение плотности дислокаций и кривизны плоскостей скольжения, преобразование мартенситной микроструктуры, частичное разложение пересыщенных твёрдых растворов и выделение частиц второй фазы, повышение упругих микро- и макронапряжений и т.д. В результате для поверхностного слоя повышаются микротвёрдость, прочность, износостойкость, ползучесть и коррозионная стойкость. Несмотря на постоянное совершенствование методов экспериментального изучения, особенности эволюции структуры, при которых происходят эти изменения, по-прежнему остаются малоизученными. Эффективным решением указанной проблемы, прослеживаемым в современной литературе, является использование, в сочетании с экспериментом, различных методов численного моделирования. Моделирование методом молекулярной динамики, хотя и имеет ограничения, связанные с размерами исследуемого материала, но с учётом самоподобия процессов, даёт хорошую возможность проследить динамику развития пластической деформации в приповерхностных слоях исследуемого материала. Целью настоящей работы является анализ основных закономерностей и механизмов формирования структурного состояния поверхностного слоя материала, подвергнутого воздействию, имитирующему ультразвуковую ударную обработку.

В качестве модельного образца рассматривался монокристалл чистого  $\alpha$ -Ti в форме параллелепипеда с размерами 75x50x20 нм. Моделирование методом молекулярной динамики осуществлялось с использованием программного пакета LAMMPS [1] и межчастичного потенциала, построенного в рамках метода погруженного атома [2]. Имитация ультразвуковой ударной обработки моделировалась путём трёхкратного индентирования поверхности образца со смещением положения индентора при каждом воздействии. Индентор представлял собой силовое поле в форме шара с радиусом 6,5 нм. На атомы, попадающие в объём этого шара, действовали дополнительные силы. Индентор погружался с постоянной скоростью 15 м/с в объём образца на фиксированную глубину 3,5 нм.

Анализ структуры образца в различные моменты времени позволил выявить закономерности развития шероховатости поверхностного слоя и развитие пластической деформации приповерхностного слоя при воздействиях сферическим индентором. Установлено, что движение индентора сопровождается зарождением дислокаций в области контакта и последующим их распространением по плоскостям лёгкого скольжения в объём материала. Кроме того, наблюдается процесс формирования двойников. Рост количества подобных дефектов структуры при последующем нагружении приводит к фрагментации и переориентации кристаллической решётки образца. При повторных внедрениях индентора площадь межзёренных границ постепенно увеличивается, и в приповерхностном слое образца титана формируется зёрненная и субзёрненная микроструктура. В сочетании с высокими сжимающими остаточными напряжениями это препятствует перемещению дислокаций в объём материала по плоскостям лёгкого скольжения. Это приводит к постепенному сужению зоны пластической деформации вокруг индентора. Кроме того, значительно улучшается перенос материала из пятна контакта на свободную поверхность, что приводит к образованию дополнительной шероховатости.

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2021-0006.*

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comput. Phys.* – 1995. – Vol. 117. – No. 1. – P. 1-19.
2. Mendelev M.I. Development of an Interatomic Potential for the Simulation of Defects, Plasticity, and Phase Transformations in Titanium / M.I. Mendelev, T.L. Underwood, G.J. Ackland // *J. Chem. Phys.* – 2016. – Vol. 145. – P. 154102.
3. Honeycutt J.D. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters / J.D. Honeycutt, H.C. Andersen // *J. Phys. Chem.* – 1987. – Vol. 91(19). – P. 4950-4963. – doi: 10.1021/j100303a014.
4. Stukowski A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces / A. Stukowski, V.V. Bulatov, A. Arsenlis // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2012. – Vol. 20(8) – P. 085007. – doi: 10.1088/0965-0393/20/8/085007.