

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения
Российской академии наук

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

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

19 - 23 сентября 2016 г.

Томск, Россия

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

4. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

а другая часть образует дефекты упаковки. С ростом предварительной упругой деформации происходит увеличение размера дефектов. Дефекты упаковки формируются по смежным направлениям и могут взаимодействовать друг с другом, образуя вакансионные цепочки. Это вызывает замедление накопления дефектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 13 «Теплофизика высоких плотностей энергии».

ОПТИМИЗАЦИЯ ПОИСКА КОНФИГУРАЦИИ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО СПЛАВА ПРИ РАСЧЁТАХ «ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ»

Никонов А.Ю.^{1,2}, Дмитриев А.И.^{1,2}, Жармухамбетова А.М.¹

¹НИ Томский государственный университет, Томск, Россия,

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия
anickonoff@ispms.ru

Стремительное развитие современных технологий существенно повышает требования к свойствам существующих материалов, а также стимулирует разработку и создание новых материалов и сплавов с заранее заданными характеристиками. Это делает проблему определения физико-механических свойств кристаллических материалов одной из фундаментальных задач физики прочности и пластичности. Современные подходы поиска новых материалов помимо экспериментальных исследований включают в себя методы компьютерного моделирования. Данные методы позволяют получить надёжные предсказания для термодинамических, механических, электрических и магнитных свойств металлов без подгоночных параметров, полученных из эксперимента. Однако даже применение высокопроизводительных вычислительных систем требует расчётов, занимающих недели и месяцы. Обычно результатом моделирования являются характеристики сплавов с концентрациями компонентов, варьирующимися в диапазоне от 0 до 100%. При этом зачастую целью исследований является не изучение всех возможных сплавов, а поиск точных концентраций компонентов сплава с требуемыми параметрами. В связи с вышеизложенным, целью настоящей работы является разработка алгоритма, позволяющего оптимизировать объём вычислений «из первых принципов» для поиска химического состава многокомпонентного сплава с заранее заданными свойствами.

Для разработки алгоритма использовались данные, полученные для сплава $Ti_xNb_yZr_z$. Расчёты проводились с использованием метода Точных МТ-орбиталей в приближении когерентного потенциала. В основе алгоритма лежит градиентный метод нахождения экстремума функции. Суть алгоритма заключается в следующем. Тернарный график зависимости искомой величины от концентрации компонентов сплава разбивается на треугольные сегменты с шагом концентрации 10%. Рассчитываются значения искомой переменной в трёх соседних точках, расположенных в вершинах сегмента. Оптимальным является выбор треугольника, расположенного в центральной части всех рассматриваемых конфигураций трёхкомпонентного сплава. Сопоставляя полученные значения, соответствующие вершинам рассматриваемого треугольника, находим наибольшее/наименьшее значение из трёх. Наибольшее значение выбирается в случае, если все три значения больше искомого и наоборот – наименьшее в случае, если все три значения меньше искомого. Следующий рассматриваемый треугольник в алгоритме поиска требуемой конфигурации будет иметь общую грань с первым треугольником. Эта грань расположена между двумя точками, имеющими меньшее/большее значение вычисляемого параметра. Таким образом, для того, чтобы определить направление дальнейшего движения, нужно вычислить значение искомого параметра только в одной

4. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

вершине, поскольку два других значения уже известны из предыдущего треугольника. Далее последовательность действий повторяется и таким образом можно найти треугольник, в котором значения искомого параметра будут максимально близки к заданному значению.

Предложенный алгоритм позволяет существенно сократить необходимый объем вычислений. Оценки показывают, что в определённых случаях число вычислений может быть уменьшено не только в несколько раз, но и на порядок. Ограничением предлагаемого алгоритма поиска оптимальной конфигурации многокомпонентного сплава, обладающего заданными свойствами, является проблемы возможного существования, так называемых локальных минимумов и «плато». В том и другом случае, если получаемые конфигурации сплавов не соответствуют искомым характеристикам, могут быть использованы стандартные методики выхода из локальных минимумов или «плато», применяемые в различных алгоритмах по оптимизации. Одним из способов, например, является задание некоторого случайного значения, для того, чтобы покинуть «плато» или локальный минимум. В любом случае, при расчёте свойств сложных многокомпонентных сплавов использование алгоритма по оптимизации вычислений представляется оправданным.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ОТНОСИТЕЛЬНОГО ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЯ Ni С АМОРФНО-ПОДОБНЫМ ПОКРЫТИЕМ Ni-P

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

¹НИ Томский государственный университет, Томск, Россия,

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия
anickonoff@ispms.ru

Благодаря своим уникальным свойствам покрытия на основе различных соединений никеля представляют значительный интерес для различных отраслей промышленности. Так покрытия на основе никель-фосфора характеризуются высокой стойкостью в щелочных растворах, безвредностью соединений, высокой гидростойкостью и значительной износостойкостью. Основное назначение никель-фосфорных покрытий – это повышение твёрдости и сопротивления механическому износу. Еще в середине прошлого века было установлено [1], что в зависимости от концентрации фосфора никель-фосфорные соединения могут образовывать различные структурные фазы. В частности, при концентрации фосфора в никеле >8,5 мас.% наблюдается образование аморфной фазы. В ряде работ показано, что подобные покрытия используются, в том числе, в качестве твёрдой смазки. Целью настоящей работы было исследование особенностей механизмов относительного проскальзывания кристаллического никеля с аморфно-подобным покрытием и без него.

Для достижения поставленной цели в работе с использованием метода молекулярной динамики было проведено исследование поведения никель-фосфорного соединения в аморфно подобном состоянии в условиях сдвигового нагружения с постоянной скоростью. Дополнительно прикладывалась сжимающая сила, величина которой варьировалась в различных задачах. Взаимодействие между атомами описывалось в рамках метода погруженного атома [2].

Первоначально моделировался образец, состоящий из двух кристаллитов никеля с аморфной прослойкой без фосфора. Подобная структура является метастабильной, и сдвиговое нагружение приводит к кристаллизации аморфной прослойки. При дальнейшем нагружении происходит формирование дефектов структуры различного типа. На следующем этапе моделировался аморфный слой из атомов никеля и фосфора. В результате нагружения такого образца кристаллизации аморфного слоя не