

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В МОДЕЛЬНОМ СПЛАВЕ Ni_3Al (111)

М. С. Скоробогатов, Д. В. Дудник, Е. А. Дудник

Рубцовский индустриальный институт (филиал) ГОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова»

В последние годы наметился все возрастающий интерес к новому подходу в получении объемных наноструктурных металлов и сплавов, который является альтернативой компактированию. Этот подход основан на измельчении структуры до наноразмеров в объемных заготовках с использованием интенсивной пластической деформации (ИПД). Исследование взаимосвязи фрагментированной структуры с механическими свойствами во многих металлах привлекает внимание многих авторов [1-3]. Ведутся исследования по применению ИПД для получения ультрамелкозернистых (УМЗ) структур в труднодеформируемых сплавах и интерметаллидах, что является важной и актуальной задачей, имеющей большое научное и практическое значение. УМЗ материалы, полученные ИПД, характеризуются не только сверхмалым размером зерна, но и рядом других структурных особенностей (внутренними напряжениями, микроискажениями решетки, высокой плотностью дислокаций), которые также влияют на свойства этих материалов.

Исследование различных явлений с помощью моделирования на компьютерах стало в настоящее время признанным и быстро развивающимся направлением в науке и технике. Компьютерная тематика стала неотъемлемой частью физических исследований.

В связи с этим целью настоящей работы явилось комплексное исследование методом молекулярной динамики особенностей формирования ультрамелкозернистой структуры, полученной в зависимости от условий ИПД и геометрических параметров инструмента в процессе моделирования экструзии. Получены картины структурной трансформации сплава и рассчитаны прочностные и структурно-энергетические характеристики.

Методика компьютерного эксперимента

Объектом исследования является модельный сплав Ni_3Al . Атомы находятся в узлах двумерной гексагональной атомной плоскости (111) ГЦК решетки, структура которой соответствует сверхструктуре $L1_2$. В качестве

граничных условий задаются координаты и скорости атомов в начальный момент времени: начальные положения атомов определены узлами кристаллической решетки, начальные скорости атомов полагаются равными нулю.

Размер расчетного блока составляет 32×32 атомов. Краевые условия представляют собой матрицу в виде цилиндра из атомов Ni, соединенной с усеченным конусом в нижней части. Вид краевых условий представлен на рисунке 1.

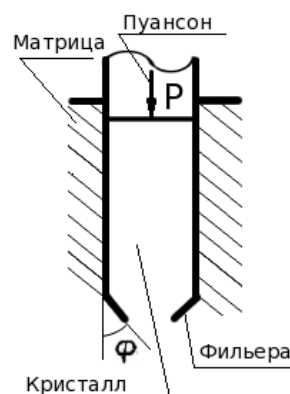


Рисунок 1 – Вид краевых условий

При моделировании процесса экструзии варьировались следующие показатели: угол сужения конической фильеры (10° - 38°), давление пуансона. В качестве уравнений движения атомов взяты уравнения движения Ньютона. Решается система обыкновенных дифференциальных уравнений с граничными и краевыми условиями численным модифицированным методом Эйлера. При деформации пуансон оказывал непосредственное давление на обрабатываемый сплав, который моделировался при помощи двух слоев атомов этого же кристалла.

Результаты и их обсуждение

В результате компьютерного эксперимента по моделированию процесса экструзии рассчитаны структурно-энергетические ха-

рактические и напряжение сплава после деформации в зависимости от угла фильеры и давления пуансона. Визуализированы структурные особенности сплава в результате ИГД: по изменению уровня потенциальной энергии атомов и изменению степени деформации кристалла.

Анализ зависимости изменения среднего напряжения в кристалле от угла конической фильеры в течение расчетного времени показал значительный рост напряжения при увеличении угла (рисунок 2). В случае угла фильеры меньше 30° в течение 40 пс изменение напряжения медленно возрастает, затем с увеличением угла фильеры и увеличением расчетного времени отмечено скачкообразное изменение кривых напряжения.

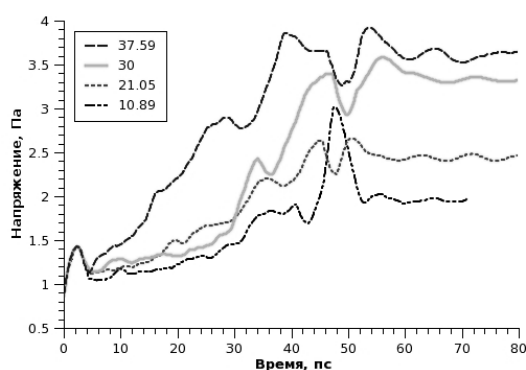


Рисунок 2 – Зависимость среднего напряжения от угла сужения конической фильеры в течение расчетного времени

На начальной стадии экструзии наблюдалась отчетливые образования переориентированных областей кристалла вдоль стенок матрицы (рисунок 3).

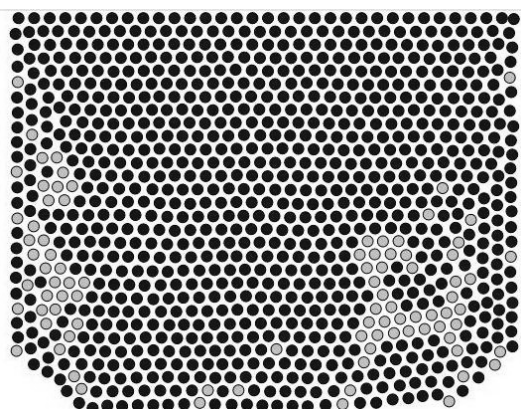
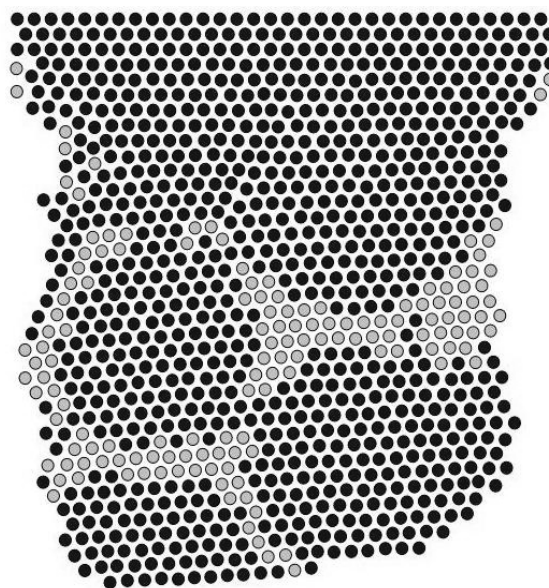
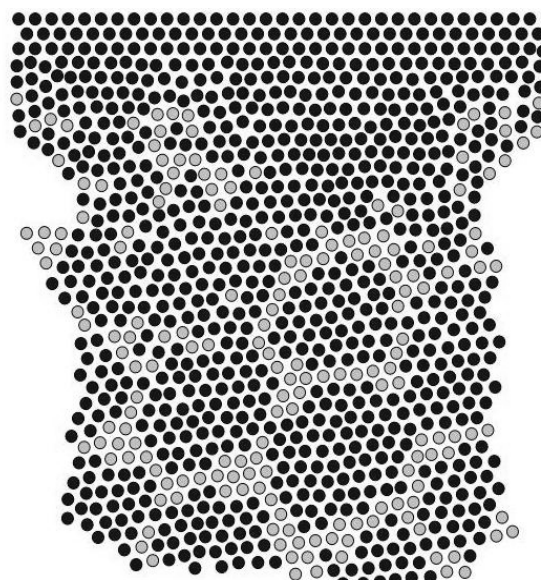


Рисунок 3 – Распределение атомов в кристалле Ni_3Al в течение 5 пс модельного времени (черным цветом окрашены атомы кристаллитов, серым – границы раздела)

Полученные результаты показали, что увеличение угла сужения конической фильеры приводит к возрастанию степени фрагментации сплава, а вблизи контакта кристалла со стенкой матрицы формируются зоны не кристалличности [3]. Выявлено, что при увеличении угла конической фильеры размер зерен уменьшается при ячеистой фрагментации кристалла.



а) 30°



б) 37.59°

Рисунок 4 – Фрагментация кристалла при различных углах фильеры в течение 40 пс модельного времени

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В МОДЕЛЬНОМ СПЛАВЕ Ni₃Al (111)

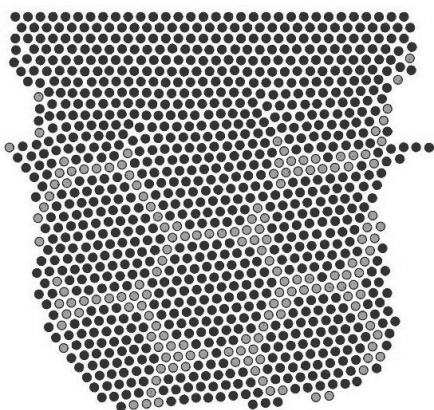
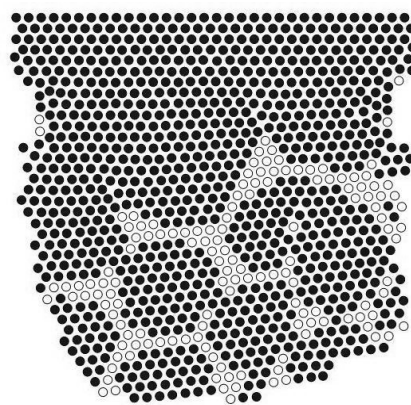


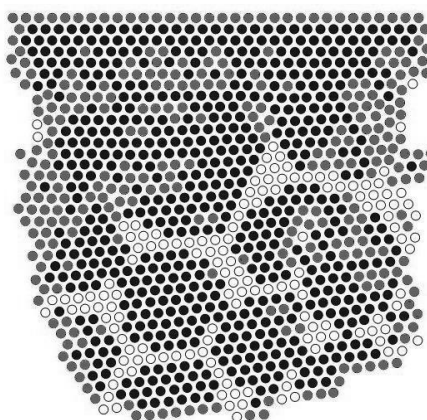
Рисунок 5 – Фрагментация кристалла при угле фильеры 30°

После завершения экструзии (см. рисунок 2, модельное время более 55 пс) система релаксирует с образованием шестиугольных фрагментов. Как видно из рисунка 5, образовавшиеся фрагменты имеют форму шестиугольника, а с течением времени форма шестиугольников становится близкой к правильным шестиугольникам. В целом, порядок атомов во фрагментах сохраняется (см. рисунок 6), но при увеличении угла фильеры возрастает количество областей, в которых отмечается нарушение порядка.

После завершения экструзии в течение расчетного времени более 60 пс локальные минимумы кривых напряжения (см. рисунок 7) отражают состояние кристалла, когда некристаллическая составляющая минимальна, фрагменты четко видны, а границы разделяющее их минимальны. Картины фрагментации кристалла в точках локального минимума графика среднего напряжения имеют схожий характер (см. рисунок 8). Отличия вызваны релаксационными процессами в кристалле. Следствием этих процессов является постепенное уменьшение амплитуды и периода колебаний графика напряжения. Гипотеза о схожести картин фрагментации в соответствующих точках подтверждается не только для точек экстремума, но и для промежуточных точек. Было выявлено, что фрагменты движутся циклически. Время одного цикла движения фрагментов совпадает с периодом колебаний графика среднего напряжения после стадии интенсивной деформации.



а) без учета порядка атомов



б) с учетом порядка атомов

Рисунок 6 – Фрагментация кристалла при угле фильеры 30°, модельное время 156 пс (черным показаны области фрагментации, серым – области с нарушенным порядком атомов, светлым – границы раздела)

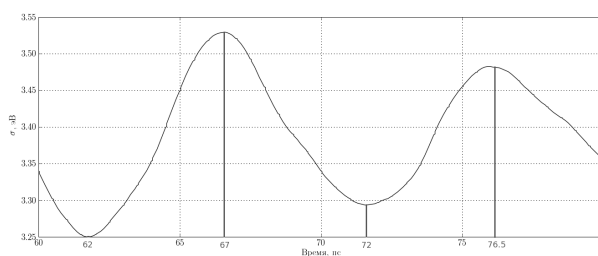


Рисунок 7 – Зависимость среднего напряжения от времени

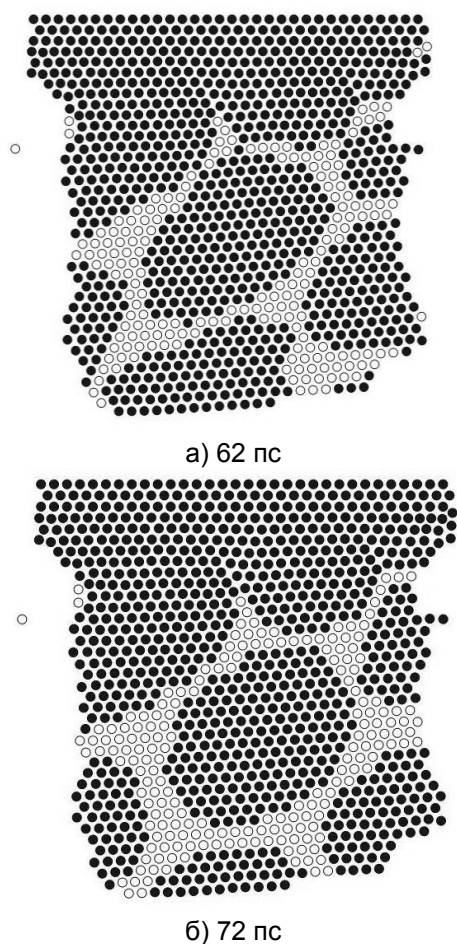


Рисунок 8 – Фрагментация кристалла в различные моменты модельного времени

Механизмы фрагментации сплава, связаны с принципом максимального производства энтропии: произвольная неравновесная система стремится к локально-равновесному состоянию с экстремальной скоростью. В результате движения дислокаций энергетически выгодны образования локальных упорядоченных фрагментов, правильной шестиугольной формы, минимально смещенных относительно друг друга.

Результаты настоящей работы, полученные при помощи компьютерного моделирования, коррелируют с результатами экспериментов и теоретических оценок [4].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Валиев, Р. З. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией / Р. З. Валиев, И. В. Александров. – М. : Логос, 2000. – 272 с.
2. Valiev, R. Z. Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation / R. Z. Valiev, R. K. Islamgaliev, I. V. Alexandrov // *Progr. Mat. Sci.* 2000. 45 (2). – P. 103-189.
3. Интенсивная пластическая деформация поликристаллической меди в условиях сухого жесткого трения / Д. З. Грабко, О. А. Шикимака, Е. Е. Харя, Е. Ф. Кирняк, С. Е. Александров, Е. А. Лямина // Сборник тезисов докладов международная конференция «Первые московские чтения по проблемам прочности материалов. – М., 2009. – с. 59.
4. Lyamina E., Alexandrov S., Grabco D., Shikimaka O. // *Key Eng. Mater.*, 2007. p. 345-346.