ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА АТОМОВ ВТОРОЙ ФАЗЫ НА ПЛАСТИЧЕСКУЮ ДЕФОРМАЦИЮ. АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Ю. А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

В настоящее время активно разрабатываются деформационные методы получения объемных металлических наноматериалов, обладающих рядом уникальных физических и механических свойств. Частицы второй фазы способны подавлять механизмы роста зерен, происходящие в процессе активной пластической деформации, а также при отжиге, что может способствовать получению более однородной измельченной структуры металла.

Имеется значительное число экспериментальных и теоретических работ по изучению влияния частиц второй фазы на формирование структуры металлов и сплавов в процессе их интенсивной пластической деформации (ИПД). При анализе влияния частиц второй фазы на поведение материала важно определить параметры, характеризующие распределение частиц по объему. Например, фазово-полевой метод использовался для двумерного и трехмерного моделирования процесса роста зерен в материале с мелкодисперсными частицами второй фазы, где было показано, что присутствие частиц приводит к уменьшению среднего размера зерна.

Представляется интересным провести компьютерное моделирование влияния упрочняющих частиц второй фазы на деформацию ползучести поликристалла с наноразмерными зернами с целью качественного изучения упрочняющего эффекта частиц и основных механизмов деформации.

Нами исследуется влияние размера атомов частиц упрочняющей фазы на деформацию поликристаллического агрегата с наноразмерными зернами в двумерной постановке методом молекулярной динамики.

Рассматривается двумерный гексагональный кристалл, примитивная ячейка которого опирается на векторы трансляции $\mathbf{w}_1 = (a,0)$, $\mathbf{w}_2 = (a/2, a\sqrt{3}/2)$, где a- параметр решетки.

В задачи данного исследования не входило рассмотрение какого-либо конкретного материала, поэтому нами был выбран модельный парный межатомный потенциал вида:

$$\varphi_{KL} = \begin{cases} k_{KL} \left[\frac{\left(r - r_c \right)^8}{\left(r_{KL} - r_c \right)^8} - 2 \frac{\left(r - r_c \right)^4}{\left(r_{KL} - r_c \right)^4} \right], & 0 < r < r_c, \\ 0, & r > r_c, \end{cases}$$

где $K, L = \{A, B\}$, r_{KL} - положение минимума потенциала (радиус атома), k_{KL} - энергия связи пары атомов, r_c - радиус обрезки потенциала. Отметим, что этот потенциал уже использовался нами ранее. Равновесный параметр решетки в матрице равен $a_A = 1$, а в частицах он равен $a_B = 1.1$, $a_B = 1$ и $a_B = 0.9$ для атомов имеющих больший чем в матрице, такой же и меньший радиусы, соответственно.

Расчетная ячейка, с наложенными периодическими граничными условиями, включала 512×512 атомов. Объем ячейки был разбит на 6×6=36 областей шестиугольной формы. В каждой из областей задавалась определенная ориентация кристаллической решетки α . В результате возникла структура, показанная на рис. 1а, где ориентация зерен показана оттенками серого цвета. Атомы с числом ближайших соседей, отличающимся от шести, показаны черным цветом. Они располагаются на границах зерен, в ядрах дислокаций и вокруг точечных дефектов. Частицы второй фазы вводились регулярно по границам зерен и тройным стыкам, [см. рис. 1б (частицы показаны белым цветом)]. Процентное содержание атомов второй фазы 9.1%. На ячейку периодичности наложена прямоугольная сетка меченых атомов, для того, чтобы было удобнее следить за местами локализации деформации. Для удобства анализа линии сетки взяты разной толщины.

Структура подвергалась действию внешнего напряжения с заданным гидростатическим давлением p = -3.0 и максимальным касательным напряжением $au_{\max} = 0.5$, действовавшим вдоль направлений оси абсцисс и оси ординат. Расчеты проводились при температуре $T = 0.87 T_m$.



Рисунок – 1. Исходная структура без частиц (а) и с частицами второй фазы (б). Градацией серого цвета показан угол ориентации *α*.

Нами исследовались четыре материала: без упрочняющих частиц (материал 1), с частицами, имеющими радиус атомов больше

чем в матрице (материал 2), меньше чем в матрице (материал 3), и такой же как в матрице (материал 4).



Рисунок – 2. а) Зависимость сдвиговой деформации от времени и б) плотность дислокаций в материале как функция сдвиговой деформации для чистого материала 1, материала с частицами с атомным радиусом больше 2, меньше 3 и равном 4 радиусу атомов матрицы.

На рисунке 2а показано изменение деформации сдвига со временем, а на рисунке 26 зависимость плотности дислокаций от деформации сдвига для четырех материалов. Из приведенных данных следует, что во всех четырех случаях сначала происходит рост скорости деформирования и плотности дислокаций, а затем достигается режим установившегося пластического течения с постоянной скоростью деформации и неизменной

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА АТОМОВ ВТОРОЙ ФАЗЫ НА ПЛАСТИЧЕСКУЮ ДЕФОРМАЦИЮ. АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

плотностью дислокаций.

На рисунке За-г показана структура, сформировавшаяся в кристалле при степени сдвиговой деформации $\gamma = 0.86$, для материалов 1-4, соответственно. Как видно из рис. За, в материале 1 происходит заметный рост зерен. По разрывам линий сетки меченых атомов можно заключить, что сдвиг осуществляется практически только вдоль оси абсцисс, несмотря на тот факт, что вдоль оси ординат действует точно такое же сдвигаю-

щее напряжение, что и вдоль оси абсцисс. Для материала 2 (рисунок 3б), деформация идет более однородно. Имеются разрывы сетки меченых атомов, свидетельствующие о наличии деформации сдвига не только вдоль оси абсцисс, но и вдоль оси ординат. Как результат, рост зерен в этом случае замедлен. В материале 3 (см. рисунок 3в), а также в материале 4 (см. рисунок 3г), наблюдается значительный рост зерен, как и в случае чистого материала (см. рисунок 3а).



Рисунок – 3 Структура, возникшая при сдвиговой деформации $\gamma = 0.86$, для материалов 1-4, соответственно. О местах локализации деформации можно судить по разрывам сетки меченых атомов.

Таким образом, методом молекулярной динамики в работе показано, что радиус атомов частиц второй фазы оказывает значительное влияние на измельчение зерен в материале в процессе пластической деформации.

В чистом материале, имевшееся в исходной структуре вытянутое зерно еще более удлиняется, и окружающие его равноосные зерна растут. Наличие частиц второй фазы меняет ситуацию и, в зависимости от размера атомов, приводит к различным результатам. В случае с атомами большего радиуса (материал 2) происходит блокирование роста как исходного вытянутого зерна, так и окружающих его зерен. В случае с атомами меньшего радиуса (материал 3) наблюдается рост исходного вытянутого зерна и его утонение, при этом окружающие его зерна так же растут. В случае с частицами упрочняющей фазы с атомным радиусом равным радиусу матрицы (материал 4) происходит рост вытянутого зерна, оно становится шире и длиннее, но рост окружающих зерен существенно замедляется.

Автор благодарит Дмитриева С.В. за обсуждение результатов работы. Работа поддержана грантами РФФИ 11-08-97057р_поволжье_а и 10-08-90012-Бел_а.