

образование тройных стыков с двумя большеугловыми границами свидетельствует о формировании длинных параллельных большеугловых границ, которые формируют полосы микросдвига. Локализация деформации внутри полос микросдвига способствует интенсивному образованию УМЗ структуры. Показано, что доля большеугловых границ ФБУГ в Cu-Cr-Zr сплаве линейно возрастает с увеличением доли тройных стыков границ кристаллитов, содержащих три большеугловые границы FJ3, по закону: $F_{БУГ} = 0,25 + 0,8F_{J3}$. Таким образом, распад пересыщенного твердого раствора способствует ускорению кинетики формирования УМЗ структуры в Cu-Cr-Zr сплаве.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Образования и Науки РФ в рамках программы Грант Президента для государственной поддержки молодых российских ученых (Соглашение № 075-15-2020-407 от 18.03.2020).

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ α - β ПЕРЕХОДА В ТИТАНЕ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Неласов И.В.¹, Колобов Ю.Р.¹, Липницкий А.Г.²
ИПХФ РАН, Черноголовка²НИУ БелГУ, Белгород
nelasow@bsu.edu.ru

Титан и его сплавы являются широко используемыми материалами, в связи с чем важным является изучение влияющих на его механические свойства факторов, в частности, мартенситное превращение из альфа (ГПУ решётка) в омега (C_{32}) фазу при высоком давлении и при наличии сдвиговых напряжений. Для определения особенностей данного перехода использовались межатомные потенциалы [1].

В настоящей работе представлены результаты молекулярно-динамического исследования рассматриваемого перехода в титане при высокоскоростном деформировании, соответствующем условиям нагружения лазерным импульсом наносекундной длительности. Установлено, что α - β переход в титане имеет место при анизотропной деформации в условиях постоянного давления 20 ГПа по известному пути характерному для данного перехода. При этом деформация сопровождается образованием дислокаций с последующим формированием β -фазы в областях между дислокациями. При одноосной деформации вдоль направления [0001] при 300 К β фаза локализуется в полосах деформации. При температуре 700 К, а также в условиях воздействия гидростатическим отсутствие α - β переход не наблюдается.

Секция 3

При одноосной деформации в направлении $[0001]$ со скоростью 10^8 c^{-1} при температуре 300 К область, содержащая омега фазу сформировалась в полосе деформации толщиной порядка 8 атомных слоёв (рис. 1а - получен с использованием анализа числа атомов на координационных сферах). Для доказательства наличия ю фазы проведен известный анализ связей и углов между атомами [2] с использованием пакета OVITO. Для чего области внутри полос деформации сопоставлялись с идеальной СЗ2 структурой (рис. 1б). В этом случае порядок чередования атомов ГПУ и ОЦК структур позволяет однозначно определить омега фазу в полосах деформации.

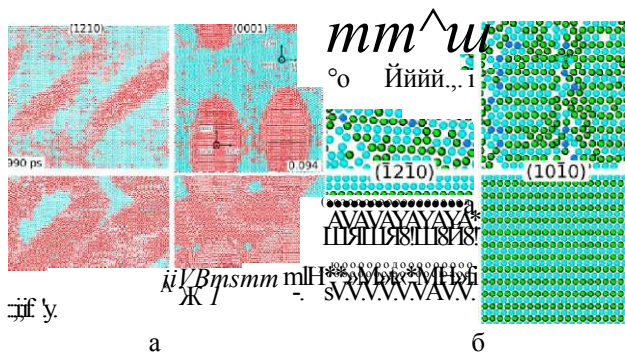


Рисунок 1 - а) Полосы деформации (указана степень деформации и время от начала деформации): светлым отмечены атомы имеющие локальное окружение характерное для ГПУ структуры, тёмным для не ГПУ б) Сопоставление областей деформации (сверху) с идеальной СЗ2 структурой (снизу). Светлым отмечены атомы с ГПУ локальным окружением, темным - ОЦК.

Работа выполнена при поддержке тематической карты фундаментальных научных исследований ИПХФ РАН № 0089-2019-0017

1. A. I. Kartamyshev, et. al., Computational Materials Science, Volume 160, 2019, P. 30-41
2. G. J. Ackland and A. P. Jones, Phys. Rev. B 73, 054104, 20060