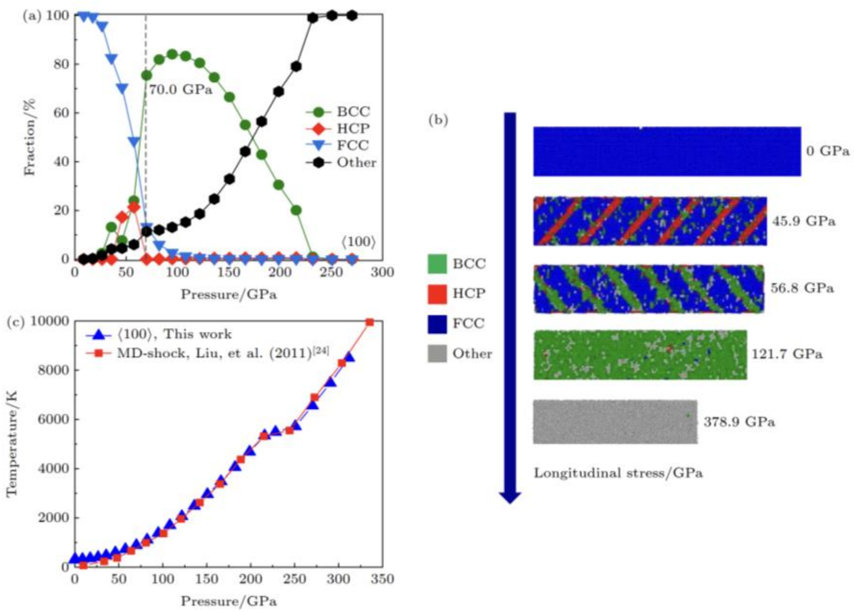
ЧЕЛЯБИНСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

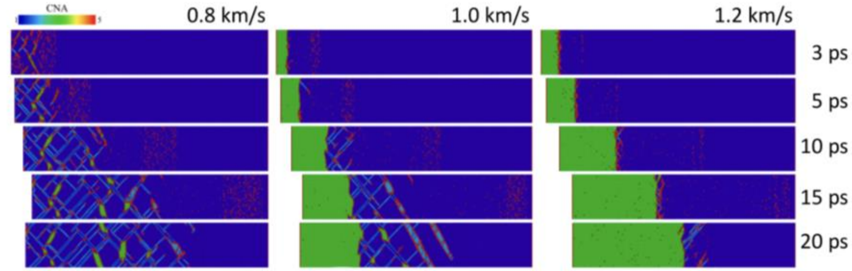
Модель фазовых переходов в Al-Cu сплавах

Грачёва Н.А., Фомин Е.В., Майер А.Е.

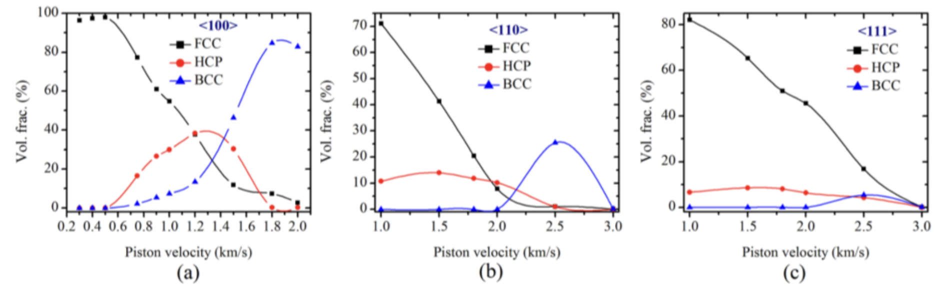
Работа поддержана Минобрнауки РФ (гос. задание НИР ЧелГУ № 075-01391-22-03) и РНФ (проект 20-11-20153)

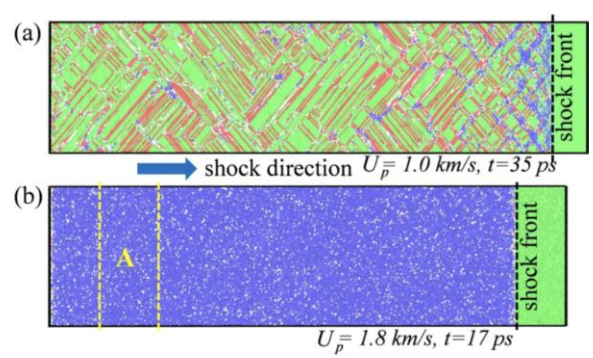


[Liu Ze-Tao, Chen Bo, Ling Wei-Dong, Bao Nan-Yun, Kang Dong-Dong, Dai Jia-Yu. Phase transitions of palladium under dynamic shock compression // Acta Phys. Sin., 2022]

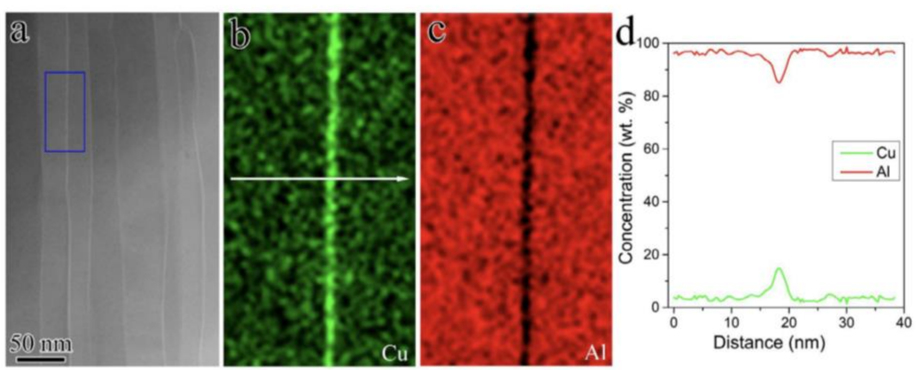


[Kai Zhao, Yang Li, Fan Zhao. Dynamic deformation of Al under shock loading // Comput. Mater. Sci., 2022]



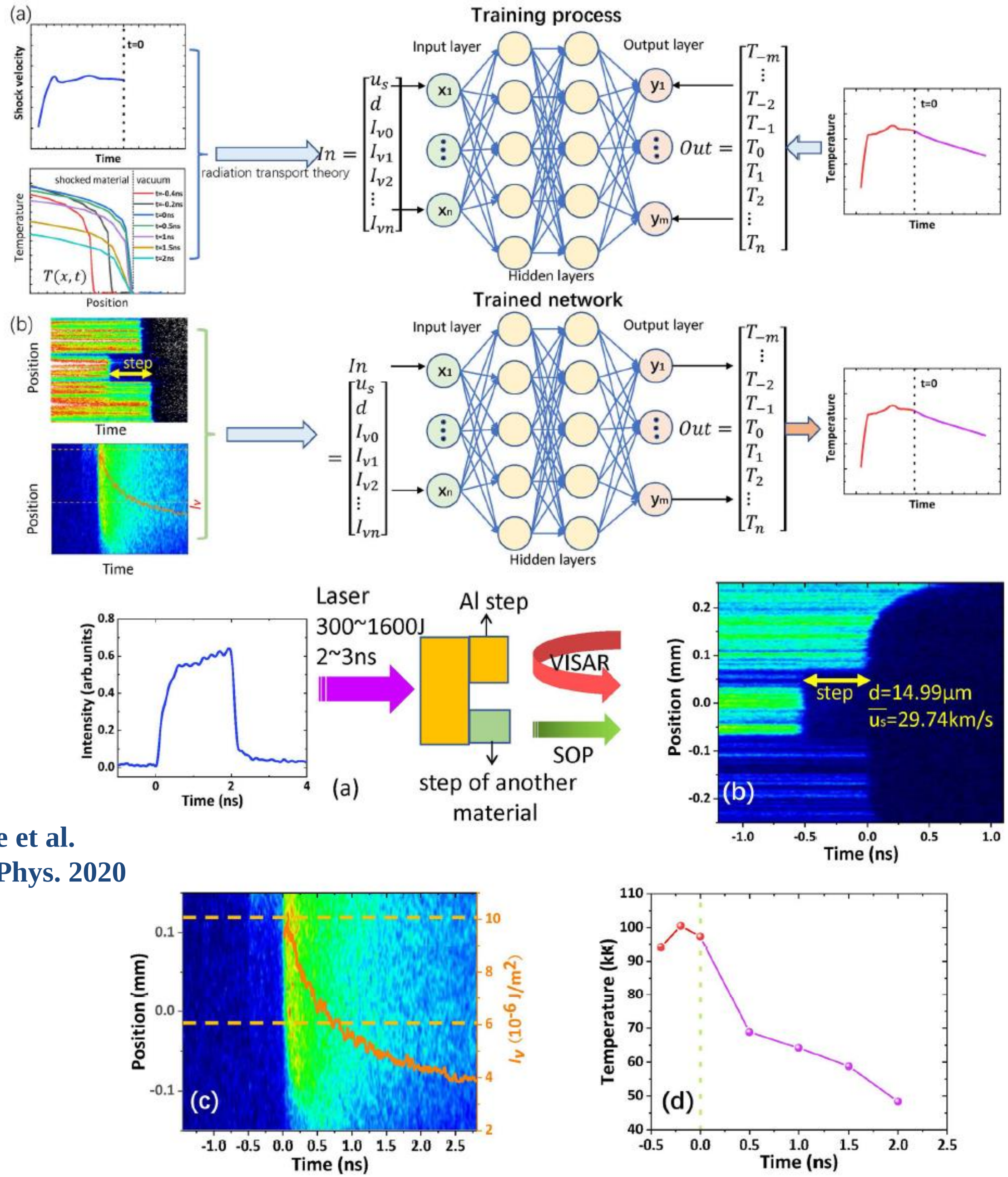


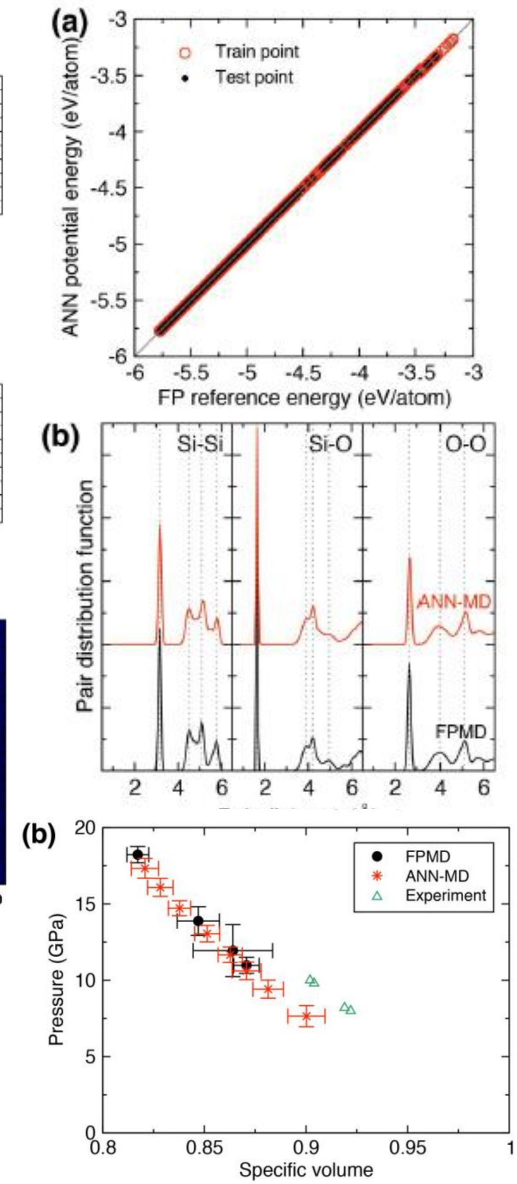
[Neogi, A., & Mitra, N. A metastable phase of shocked bulk single crystal copper: an atomistic simulation study // Scientific Reports, 2017]



[W. Xua,b , X.C. Liua , X.Y. Li a , K. Lu. Deformation induced grain boundary segregation in nanolaminated Al–Cu alloy // Acta Materialia, 2020]

Актуальность





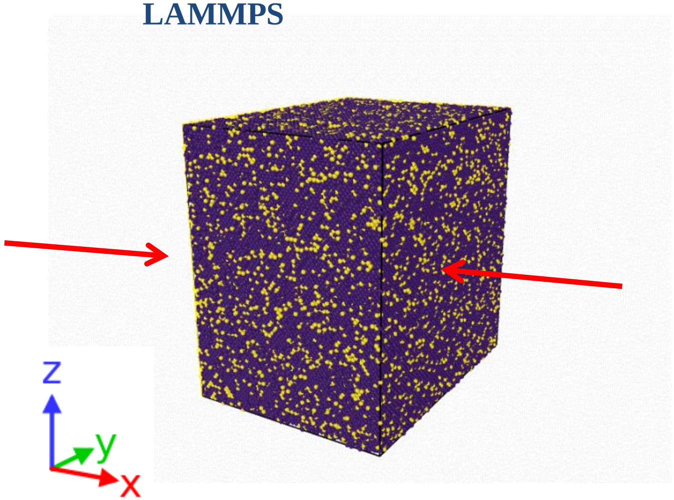
Zhiyu He et al.
J. Appl. Phys. 2020

Masaaki Misawa et al.
J. Phys. Chem. Lett. 2020

Молекулярно динамическое моделирование деформации монокристаллов

Одноосное сжатие

LAMMPS



AL atoms
CU atoms

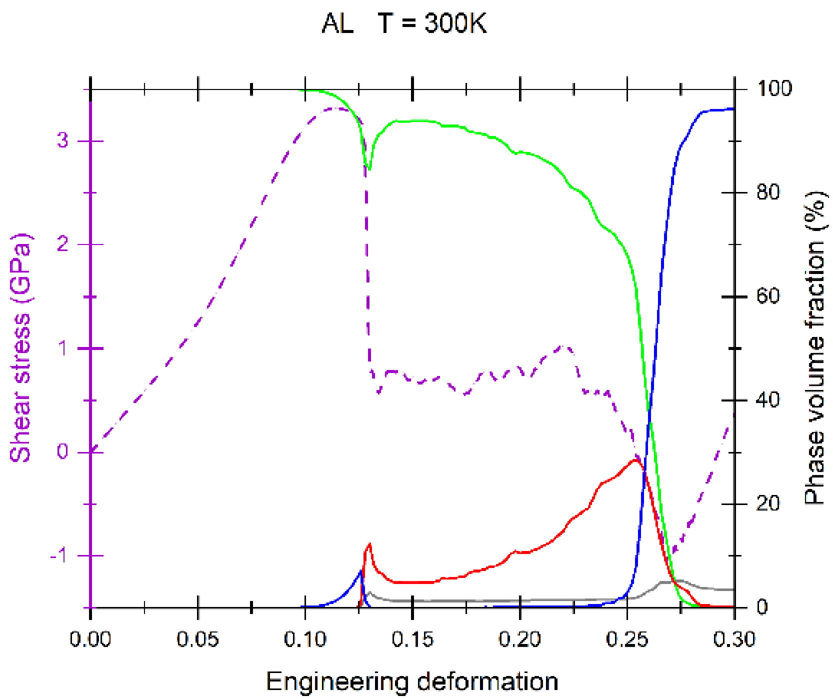
Алюминий
Медь
Al-Cu сплавы

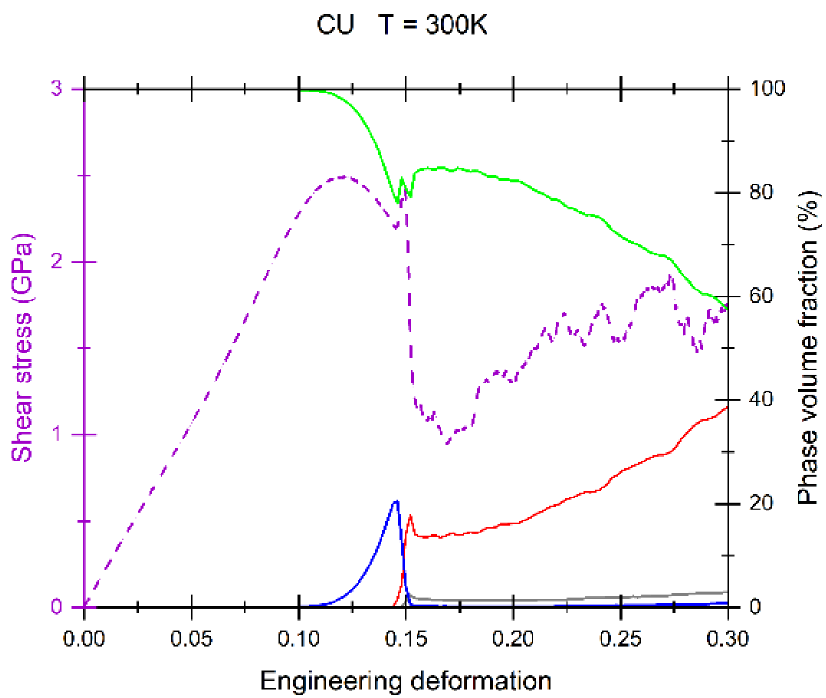
- первоначальный размер кристаллов (20.25 нм)^3
- периодические граничные условия
- потенциал **ADP**
- число атомов в кристалле **500 тыс.**

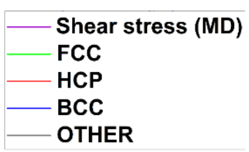
F. Apostol, Y. Mishin. Interatomic potential for the Al-Cu system // Physical Review B.

Температура, K	Концентрация меди в сплаве AL-CU, %
100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900	0, 10, 20, 30, 50, 70, 80, 100

Алюминий и медь при T=300K



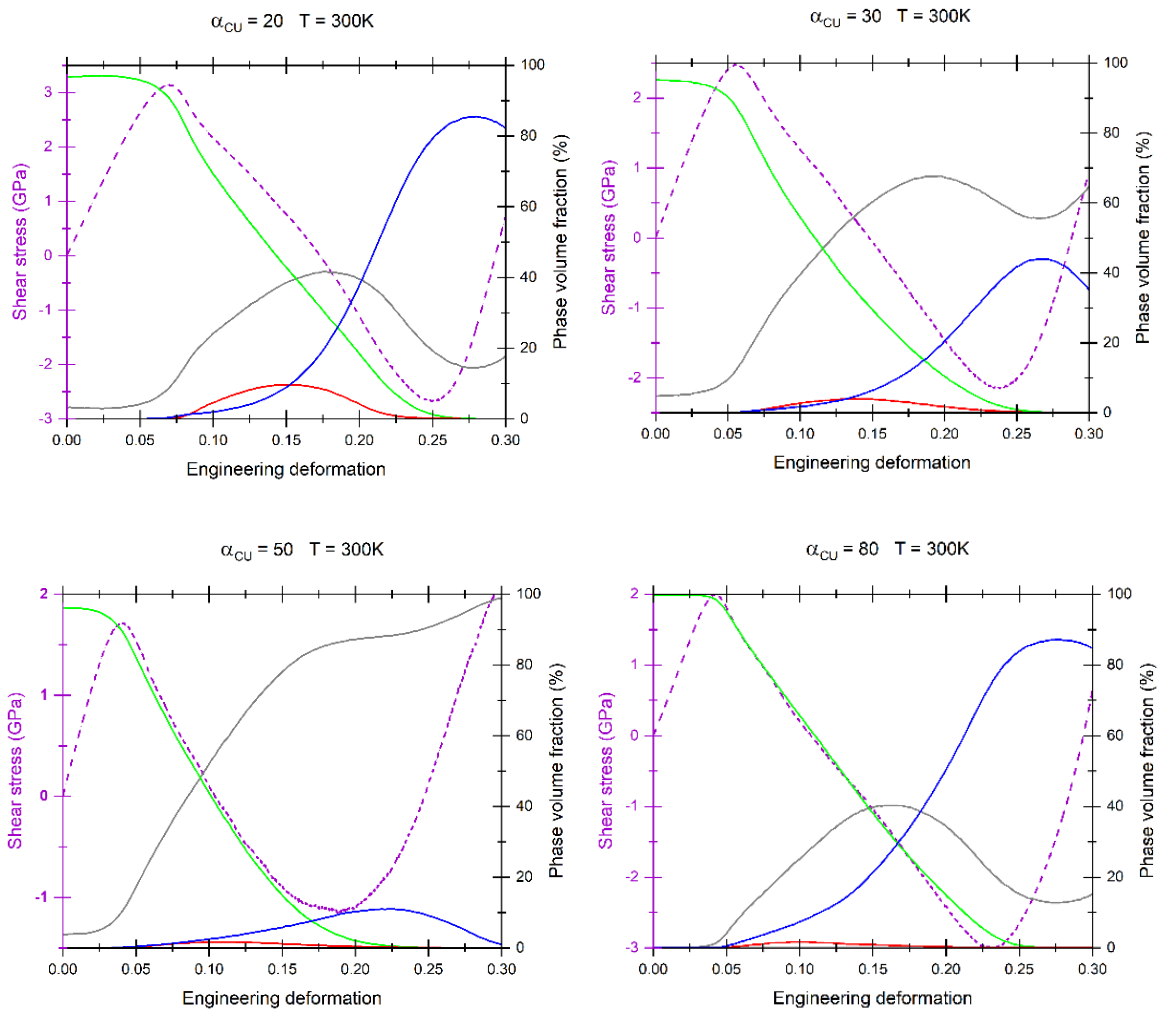


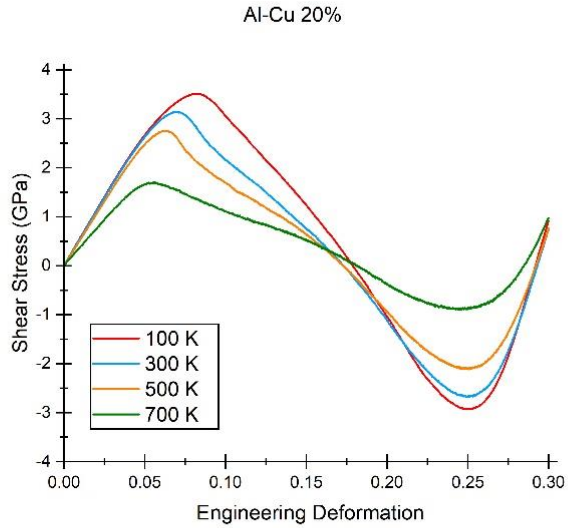


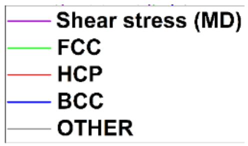
$$\dot{\varepsilon} = 10^9 \ c^{-1}$$

Сплавы при T=300K

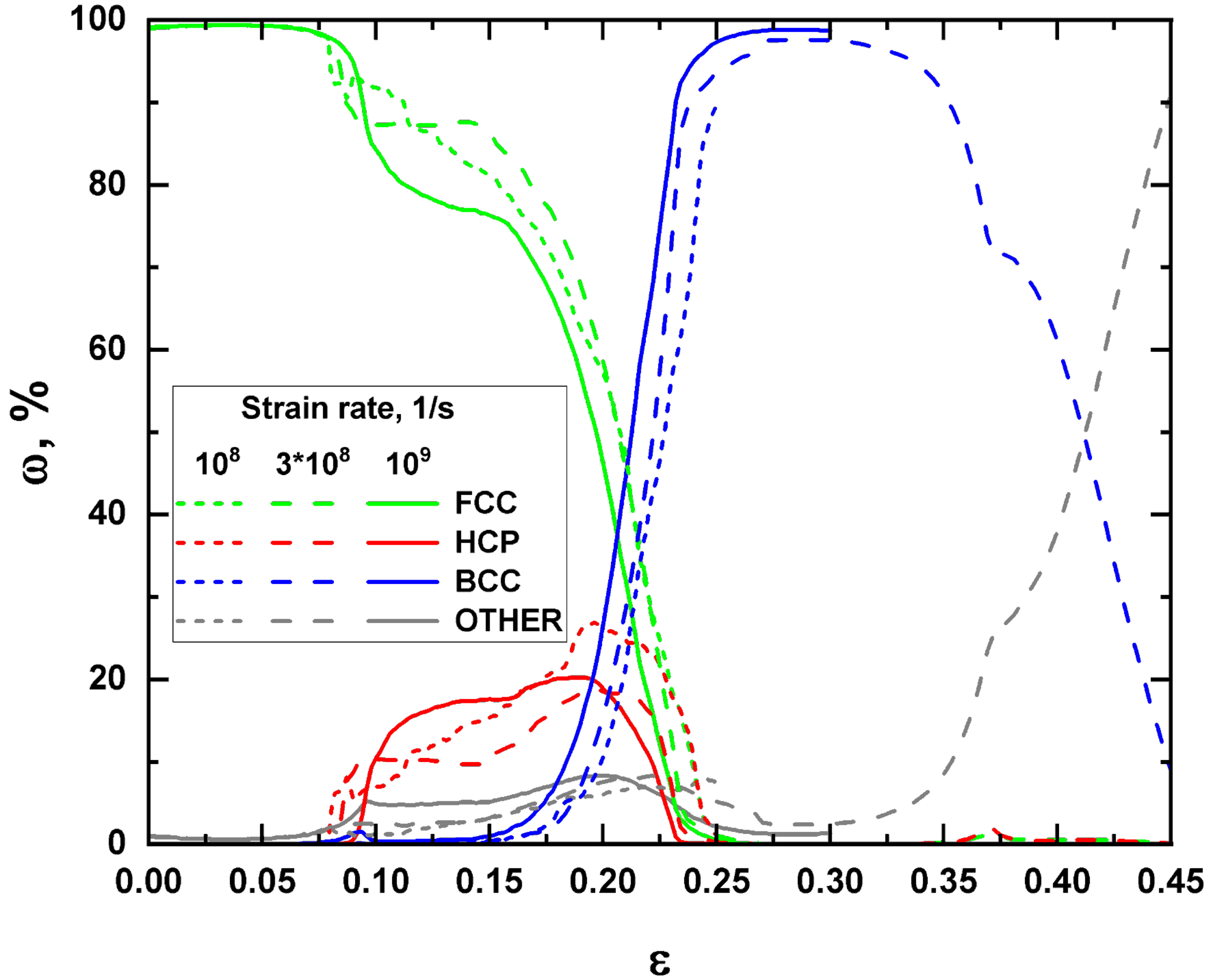
α_{Cu} = 20%

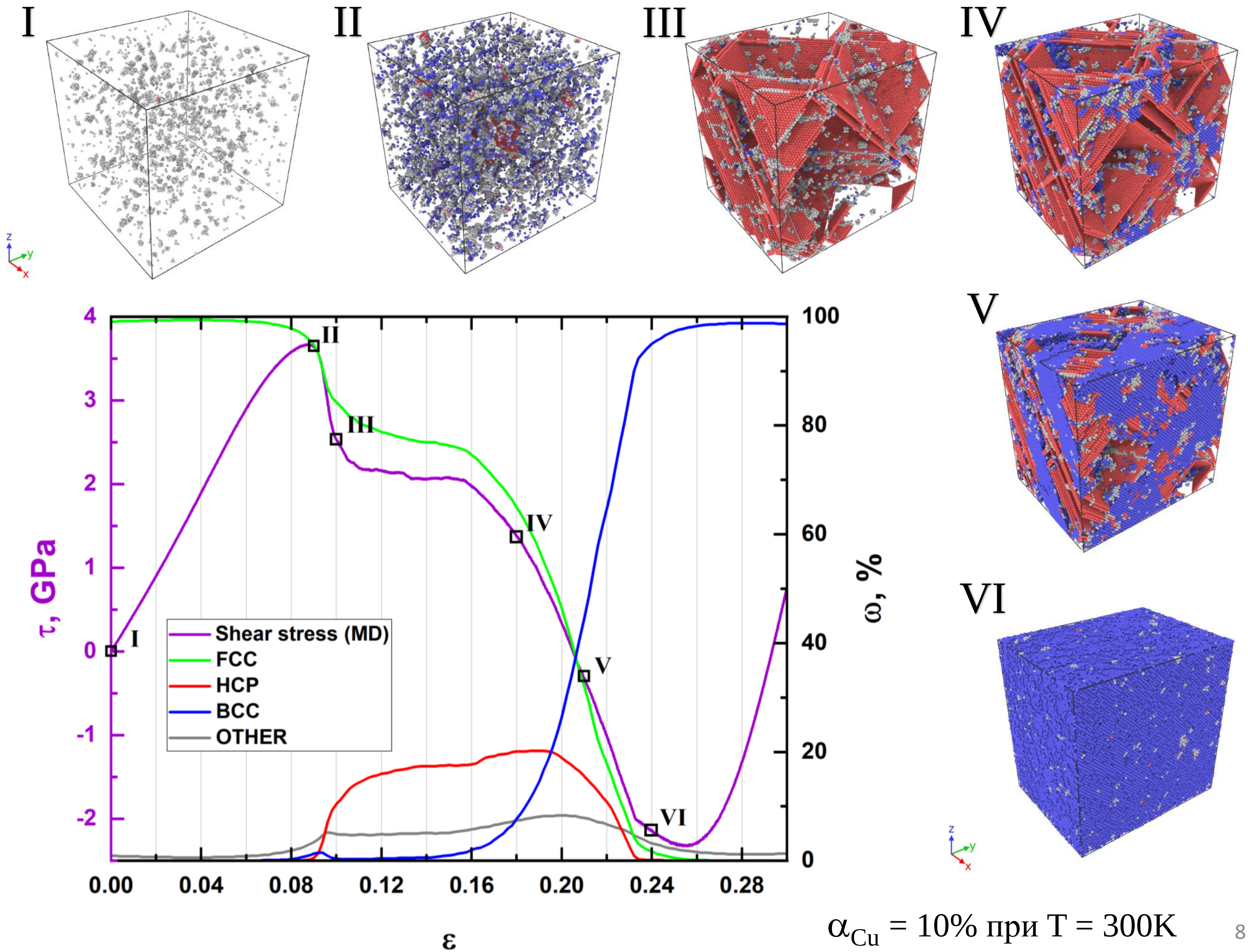






α_{CU} = 10% при T = 300K





α_{Cu} = 10% при T = 300K

Модель релаксации напряжений

Градиент макроскопических деформаций:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^f \mathbf{F}^p \mathbf{F}^e$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} L_x/L_0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Фазовые переходы

$$F_{11}^f = \left(n_1\omega_{BCC} + n_2\omega_{OTHER}\right) + 1,$$

$$F_{22}^f = \frac{1}{\sqrt{F_{11}^f}}$$

Пластичность

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \begin{pmatrix} \dot{w}F_{11}^p & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{w}F_{11}^p/2 & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{w}F_{11}^p/2 \end{pmatrix}$$

$$F_{11}^p = \exp(w) \qquad F_{22}^p = \frac{1}{\sqrt{F_{11}^p}}$$

$$\mathrm{F}_{11}^e = \frac{\mathrm{F}_{11}}{\mathrm{F}_{11}^f\,\mathrm{F}_{11}^p} \qquad \mathrm{F}_{22}^e = \frac{\mathrm{F}_{22}}{\mathrm{F}_{22}^f\,\mathrm{F}_{22}^p}$$

Тензор конечных деформаций Грина:

$$\mathbf{E}^e = \frac{1}{2}\left[\left(\mathbf{F^e}\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{F^e} - \mathbf{I}\right]$$

$$\rho = \frac{\rho_0}{\sqrt{\left(2E_{11}^e + 1\right)\left(2E_{22}^e + 1\right)^2}}$$

ANN: EOS $\quad \{\alpha_{Cu}, \rho, T\} \rightarrow \{P, E, K\}$

$$s = \frac{4}{3}G\left(E_{11}^e - E_{22}^e\right)$$

$$\sigma = -P + s$$

$$\tau = -\frac{3}{4}s$$

Дислокационная пластичность

$$Y_b = Y_0 + AGb\sqrt{\rho_D}$$

$$\dot{w} = \chi^{-1}\left(\frac{1}{2}s - \frac{1}{3}Y_b\,\mathrm{sign}(s)\right)(\omega_{FCC} + \omega_{HCP})\,H\left(\frac{1}{2}|s| - \frac{1}{3}Y_b\right)$$

[T. V. Popova, A. E. Mayer, K. V. Khishchenko. J. Appl. Phys. 2018]

$$\chi = \frac{8B}{3\rho_D b^2}$$

$$\dot{\rho}_D = Q_n + Q_m - Q_a,$$

$$Q_n = \frac{2\pi\rho c_t}{m_1}\exp\left[-\frac{k_n G b^3}{k_B T}\right]H(-Q_\varepsilon)$$

нуклеация

[A. E. Mayer, P. N. Mayer, M. V. Lekanov, B. A. Panchenko, Metals 2022]

$$Q_m = \frac{b}{\varepsilon_D}\left(\frac{3}{2}S\dot{w}\right)$$

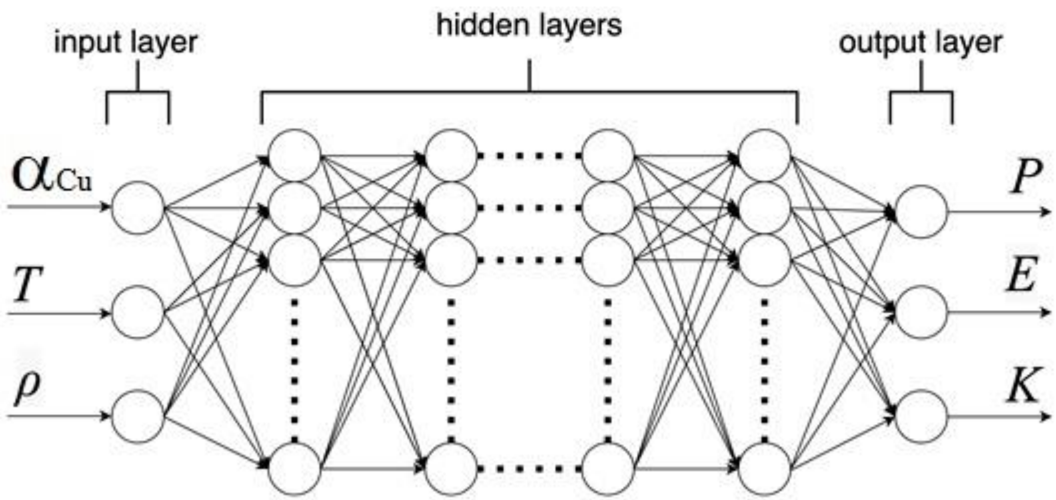
размножение дислокаций

$$Q_a = 2K_a\rho_D\dot{w}$$

аннигиляция

ANN $\{\alpha_{Cu}, \rho, T\} \rightarrow \{G, Q_\varepsilon\}$

Искусственные нейронные сети



5 скрытых слоев по 20 нейронов

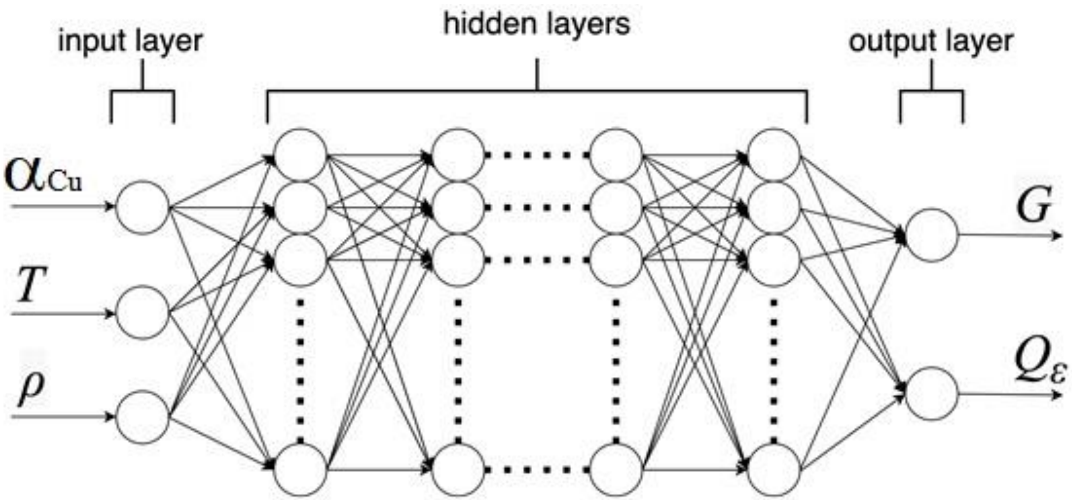
hidden layers: PReLU $a = \begin{cases} z, & \text{if } z > 0 \\ a_{pr} z, & \text{if } z \le 0 \end{cases}$

output layers: sigmoid function $a = \dfrac{1}{1+e^{-z}}$

$$x_{norm} = (x - x_{min}) / (x_{max} - x_{min})$$

$$\boldsymbol{\theta} \to \boldsymbol{w}, b$$

$$\boldsymbol{z} = \sum \boldsymbol{wx} - b$$

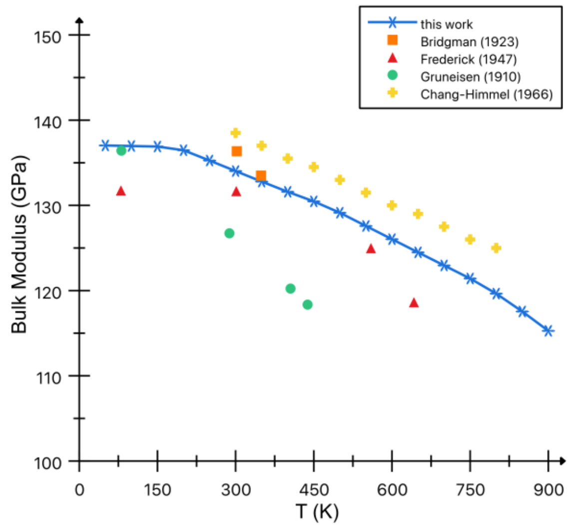


6 скрытых слоев по 20 нейронов

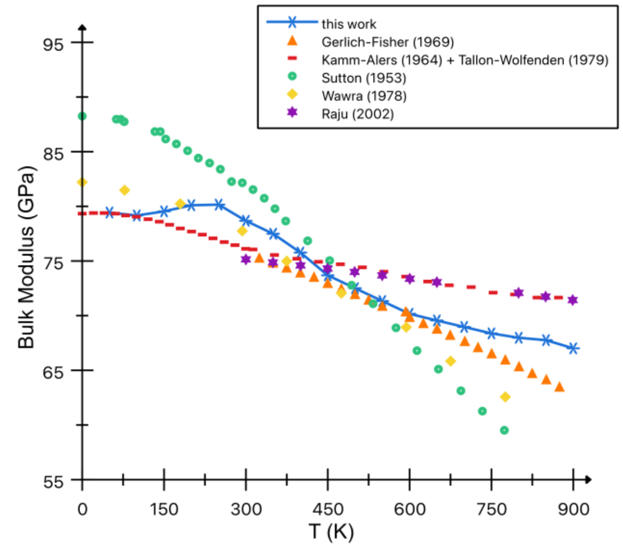
hidden layers: Swish $a = \dfrac{z}{1+e^{-\beta z}}$

output layers: sigmoid function $a = \dfrac{1}{1+e^{-z}}$

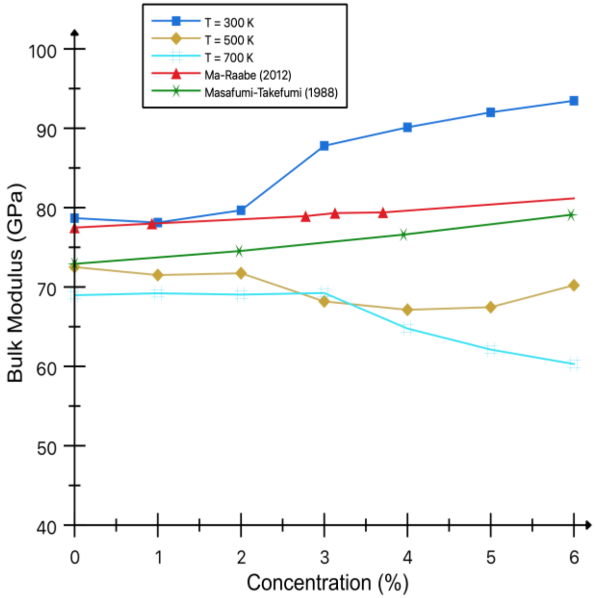
Cu

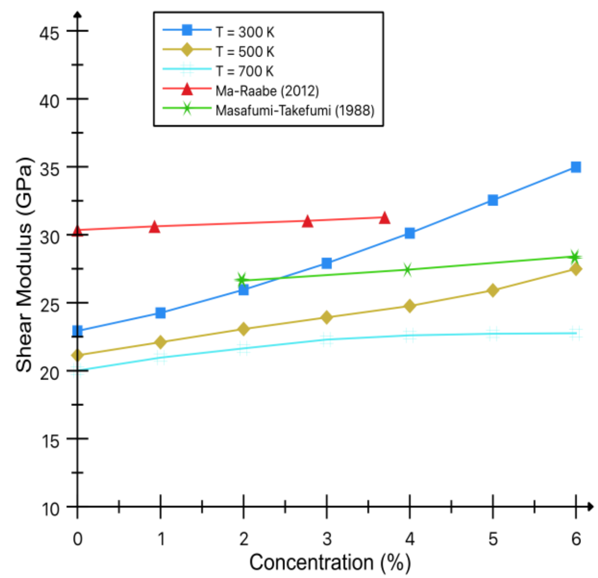


Al



Твердый раствор с малой концентрацией меди в алюминии





Модель эволюции фазовой структуры

$$\frac{d\omega_{FCC}}{d\varepsilon} = -K_1\omega_{FCC} - K_2\omega_{FCC}$$

$$\frac{d\omega_{BCC}}{d\varepsilon} = K_1\omega_{FCC} + K_4\omega_{OTHER} - K_3\omega_{BCC}$$

$$\frac{d\omega_{OTHER}}{d\varepsilon} = K_2\omega_{FCC} + K_3\omega_{BCC} - K_4\omega_{OTHER}$$

$$K_\beta = K_{0\beta}\exp\left[\frac{U_\beta - V_0\left(\varepsilon_{1\beta}\sigma_{11} + 2\varepsilon_{2\beta}\sigma_{22}\right)}{k_B T}\right]$$

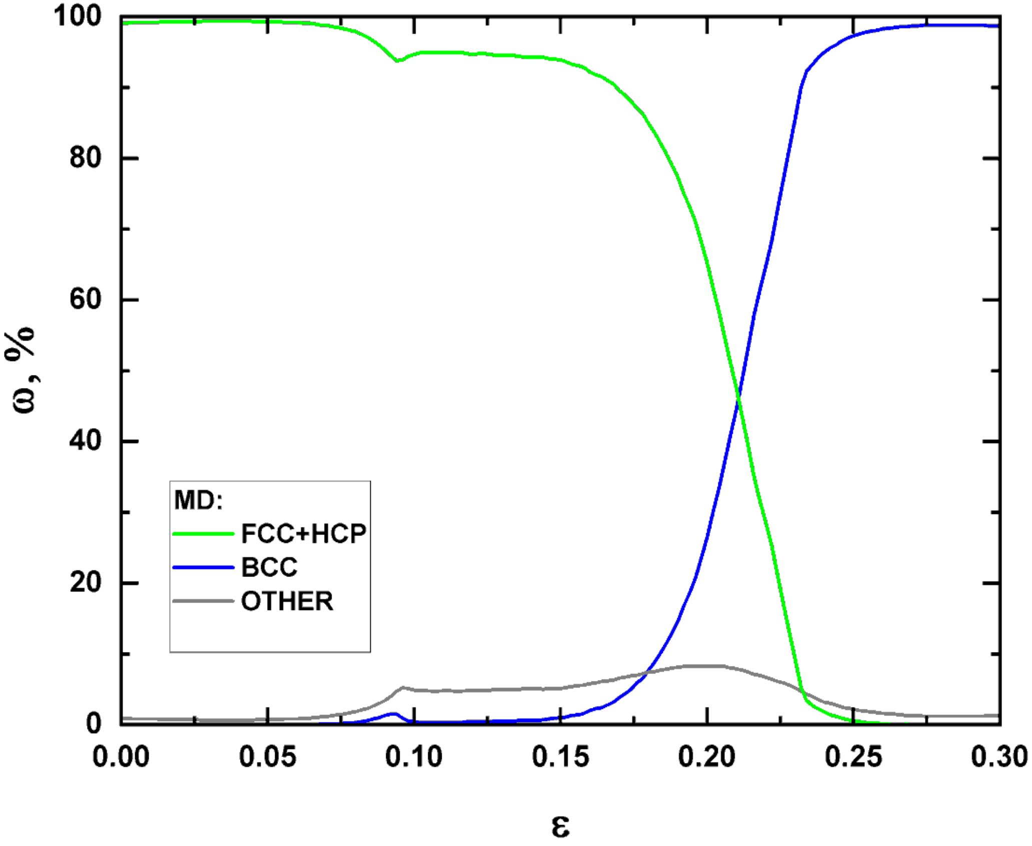
$\beta = 1: FCC \to BCC$

$\beta = 2: FCC \to OTHER$

$\beta = 3: BCC \to OTHER$

$\beta = 4: OTHER \to BCC$

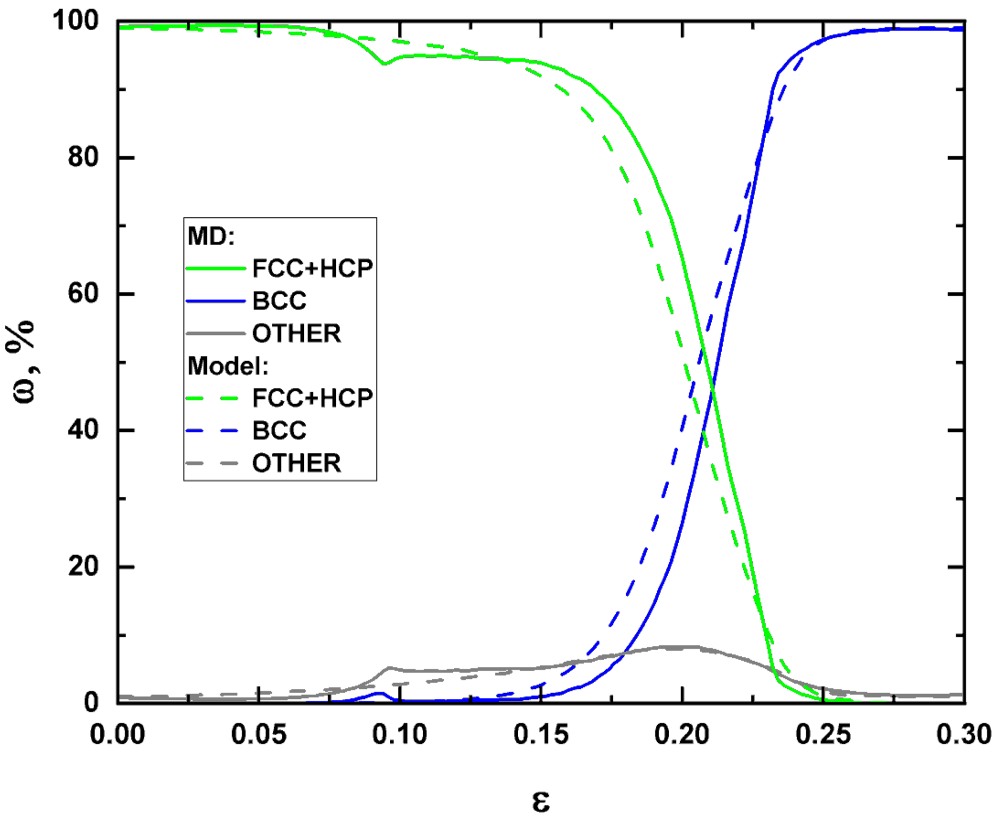
α_{Cu} = 10% при T = 300K



Подбор параметров моделей методом Байеса

$$P = \prod_n \exp\left\{ -k \left[\left(\frac{\omega^n_{model} - \omega^n_{MD}}{\Delta\omega_{MD}} \right)^2_{BCC} + \left(\frac{\omega^n_{model} - \omega^n_{MD}}{\Delta\omega_{MD}} \right)^2_{OTHER} \right] \right\}$$

$$\Delta\omega_{MD} = \omega_{\max} - \omega_{\min}$$



$\beta = 1: FCC \rightarrow BCC$

$\beta = 2: FCC \rightarrow OTHER$

$\beta = 3: BCC \rightarrow OTHER$

$\beta = 4: OTHER \rightarrow BCC$

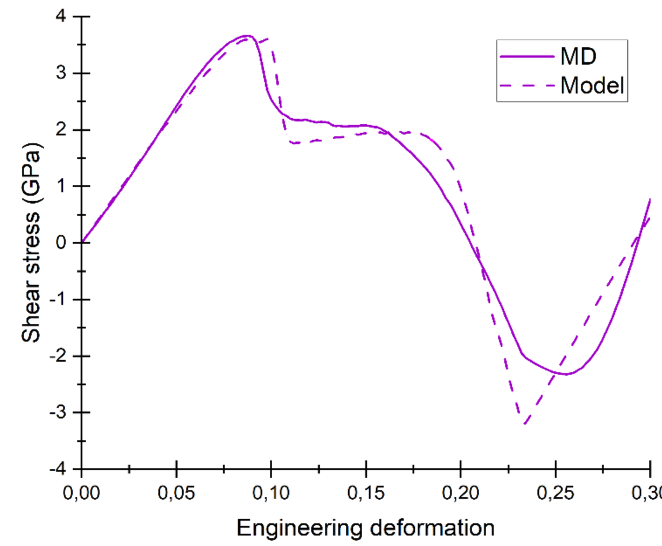
Параметр	Значение			
	β=1	β=2	β=3	β=4
$K_{0\beta}$	10^2	10^2	10	10^2
U_β, eV	0.3	0.19	0.13	0.3
V_0, m^3	10^{-30}			
$\varepsilon_{1\beta}$	0.34	0.37	0.17	0.24
$\varepsilon_{2\beta}$	0.52	0.02	0.17	0.52

Подбор параметров моделей методом Байеса

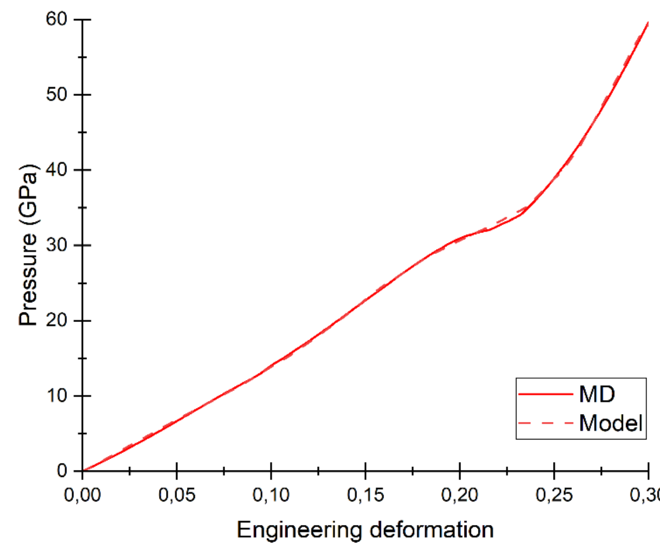
$$P = \prod_n \exp\left\{-k\left[\left(\frac{\tau^n_{model} - \tau^n_{MD}}{\Delta\tau_{MD}}\right)^2 + \left(\frac{P^n_{model} - P^n_{MD}}{\Delta P_{MD}}\right)^2\right]\right\}$$

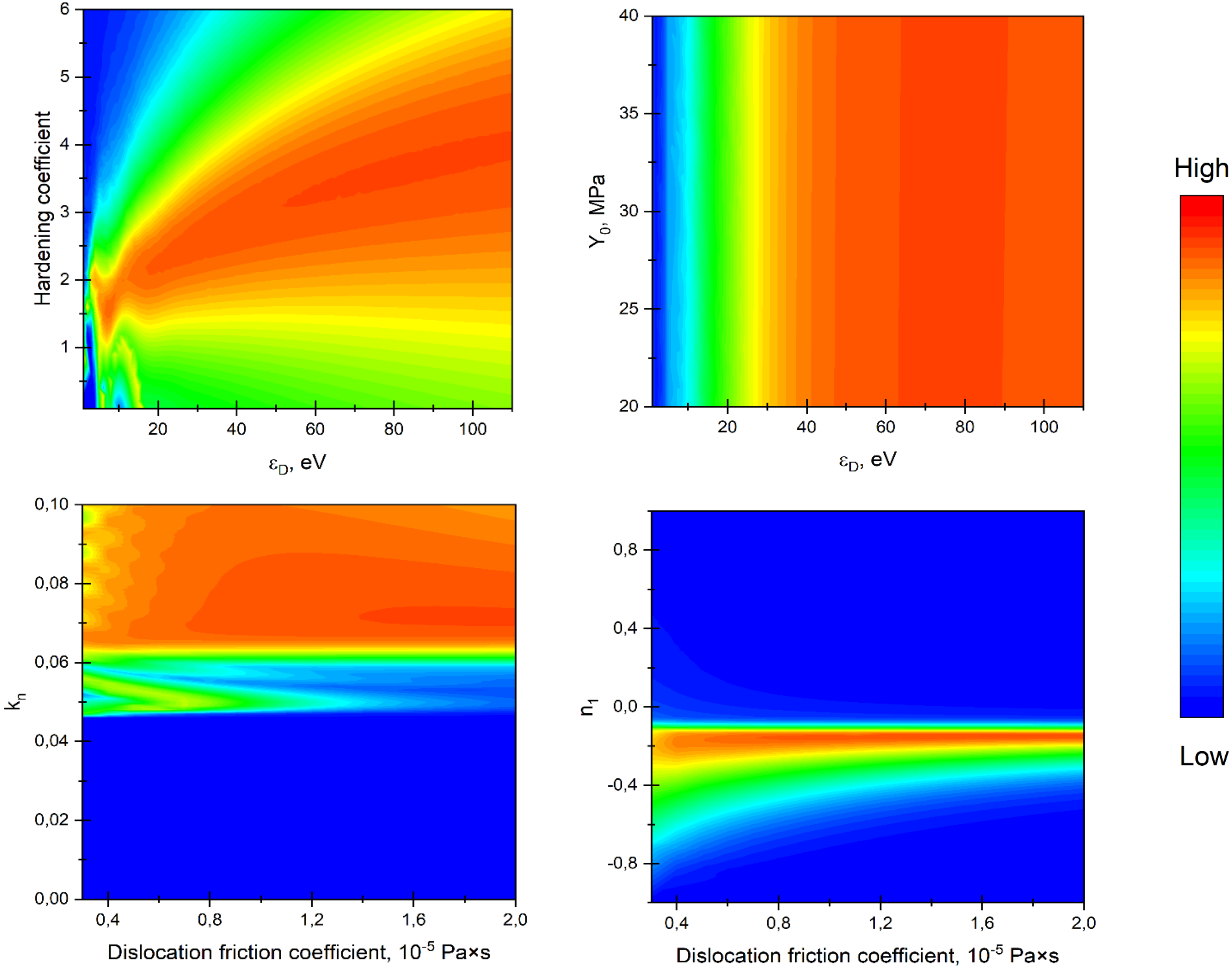
$$\tau_{model} = -\frac{3}{4}s$$

$$\tau_{MD} = \frac{1}{2}\left(\sigma_{xx} - \frac{\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{2}\right)$$



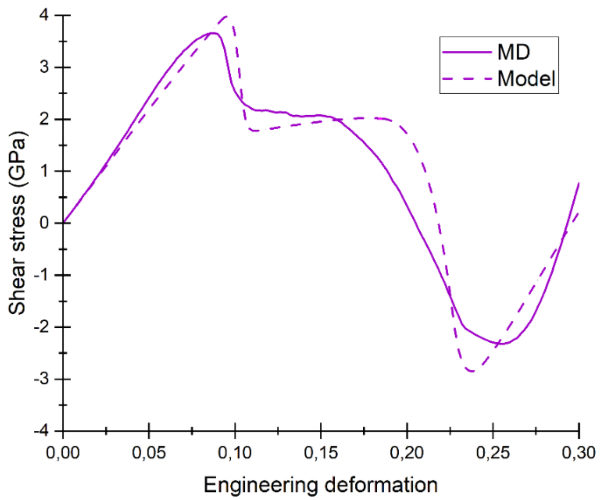
Параметр	Значение
n_1	-0.15
n_2	-0.23
B, Pa×s	1.8×10^{-5}
Y_0, MPa	30
A	3.5
k_n	0.072
ε_D, eV	74

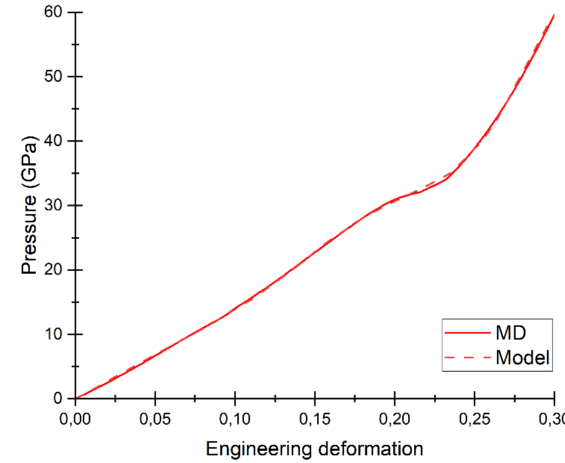


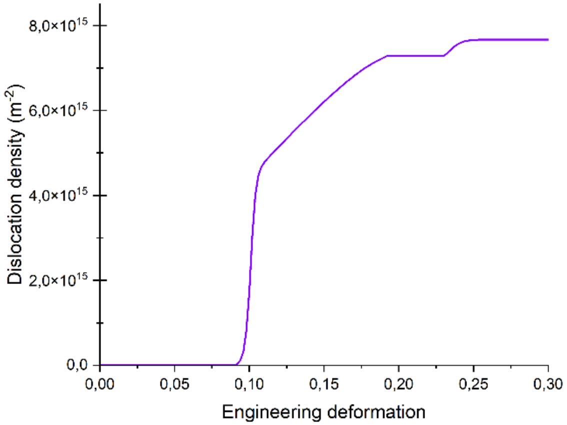


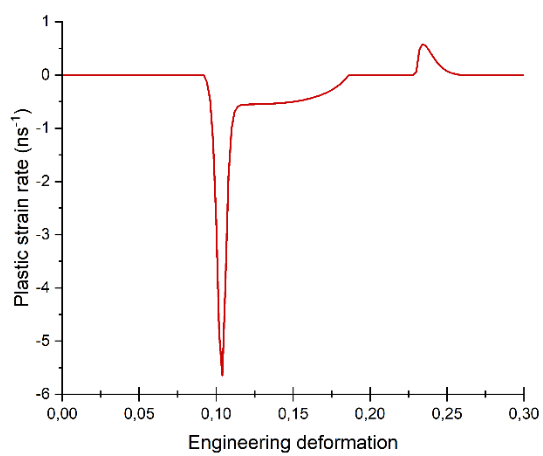
Hardening coefficient
εD, eV
Y0, MPa
εD, eV
High
Low
kn
Dislocation friction coefficient, 10-5 Pa×s
n1
Dislocation friction coefficient, 10-5 Pa×s

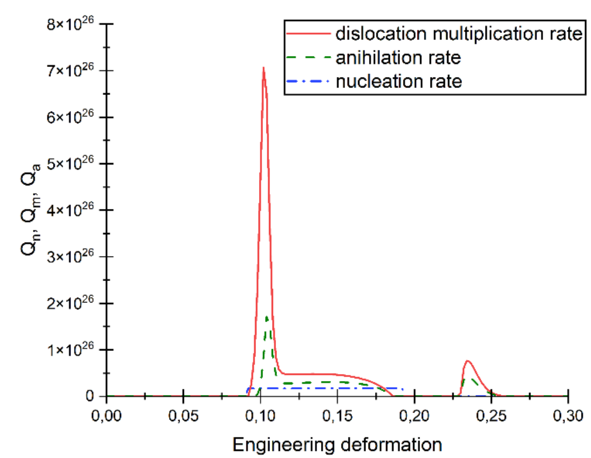
Результаты модели релаксации напряжений











Заключение

- Проведено молекулярно-динамическое моделирование одноосного сжатия и растяжения алюминиевых кристаллов с различной концентрации атомов меди в широком диапазоне температур
- Фазовый переход вносит существенный вклад в релаксацию касательных напряжений
- Сформулирована модель фазового превращения на основе уравнения Аррениуса
- Определены параметры модели пластичности и фазовых переходов методом Байеса
- Обучены две искусственные нейронные сети с прямой связью, позволяющие определять константы упругости, порог нуклеации дислокаций и рассчитывать давление в материале