



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Атомистическое моделирование формирования первичной микроструктуры при быстрой кристаллизации металлов

В.В. Дремов В.В., А.В. Караваев, П.В. Чирков, Р.М. Кичигин,
А.А. Карабутов, А.С. Бычков, Е.Б. Черепецкая, И.А. Кудинов,
А.А. Гапеев, В.В. Чеверикин, В.С. Дуб, И.А. Иванов, М.Д. Кривилев,
Н.Н. Симаков, С.А. Груздь, С.Л. Ломаев, К.Э. Купер

Коллаборация

Национальный университет науки и
технологии МИСиС, Москва, Россия



РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, Россия



РФЯЦ-ВНИИТФ

ЦНИИТМАШ, Москва, Россия



Государственный
научный центр РФ
ЦНИИТМАШ

ИЯФ СО РАН

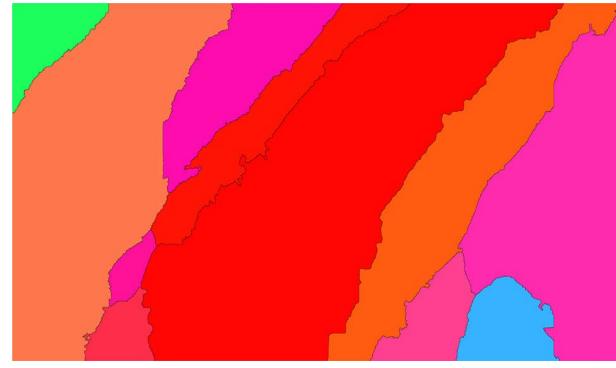
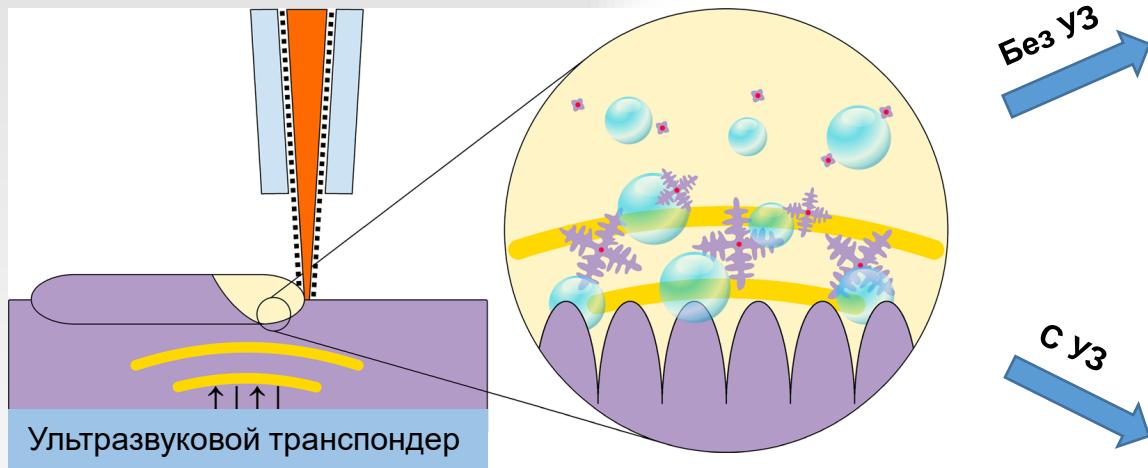


ИЯФ СО РАН

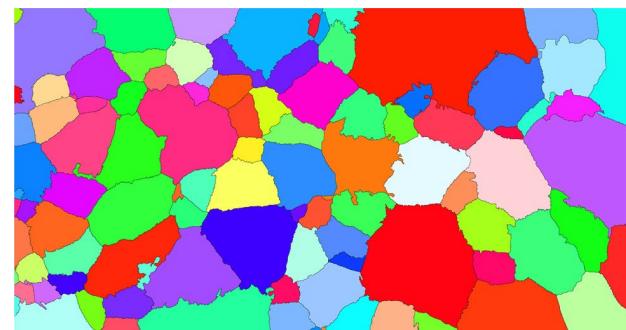
УдГУ



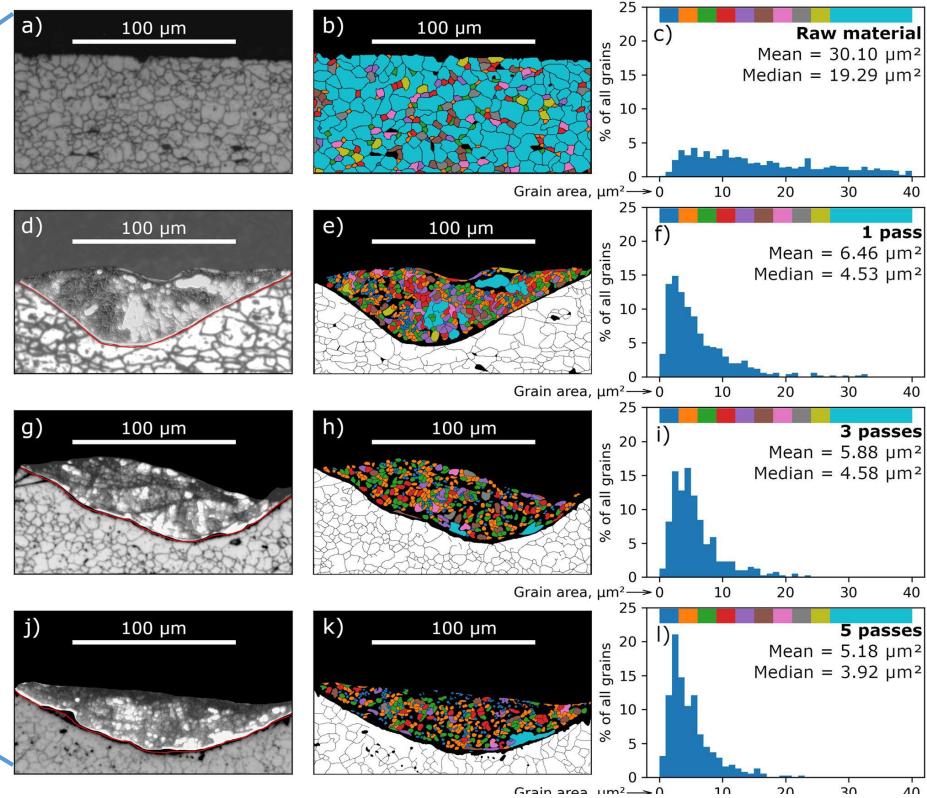
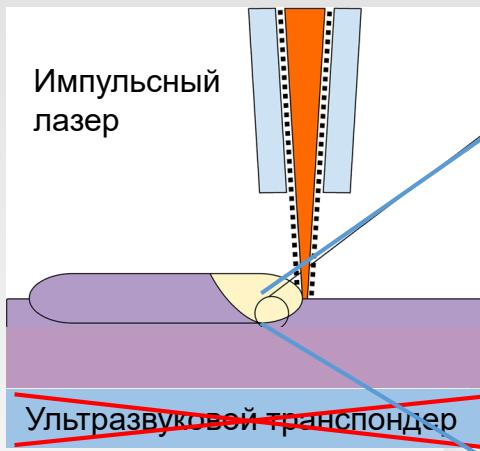
Развитие аддитивных технологий как мотивация данного исследования



Сплав Ti-6Al-4V



Развитие аддитивных технологий как мотивация данного исследования



Атомистическая модель и использованные коды



Состав : Fe-14Ni-19.5Cr

Потенциал : EAM NIST Interatomic Potentials Repository,
<https://www.ctcms.nist.gov/potentials/entry/2019-Mendelev-M-I-Fe-Ni-Cr/2019-Mendelev-M-I-Fe-Ni-Cr-LAMMPS-ipr1.html>.

MD код : LAMMPS

Учет электронной
теплопроводности : двух-температурная модель*

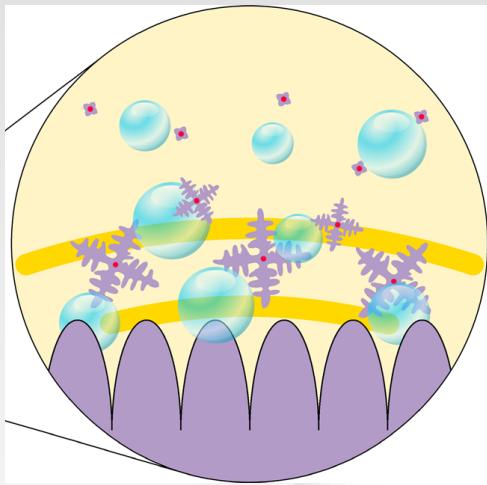
Распознавание
и визуализация : OVITO-PTM, ATA (Adaptive Template Analysis*)

Свойства	:	Эксперимент для 316L	EAM
	$T_{пл}$, К	1689	1762
	$\Delta H_{пл}$, кДж/кг	254	287
	$\Delta V_{пл}$, Å³/атом	0.36	0.678
	$\rho_{пл}^{ГЦК}$, кг/м³	7112	7554
	$\rho_{пл}^{жидк}$, кг/м³	6920	7157
	γ_{SF} , мДж/м²	20	130

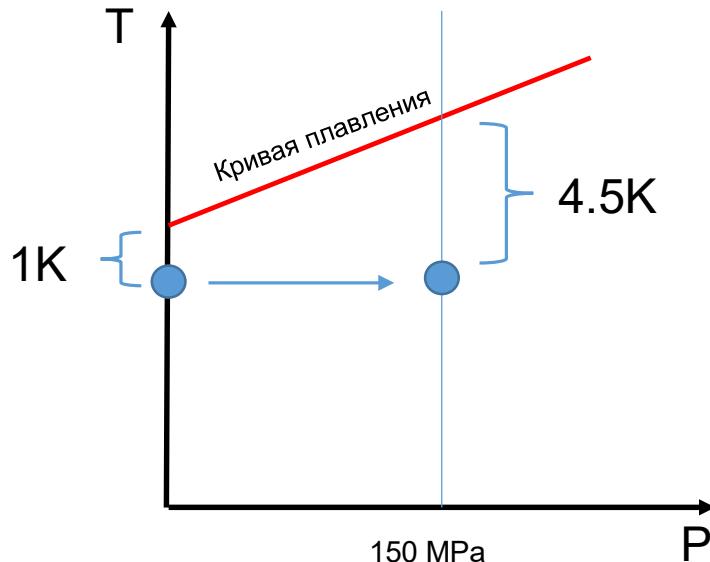
* J. Phys.:
Cond. Matter 19 (2007)
496201.

** Russian J. of Phys.
Chem. B 2 (2008) 238
– 245.

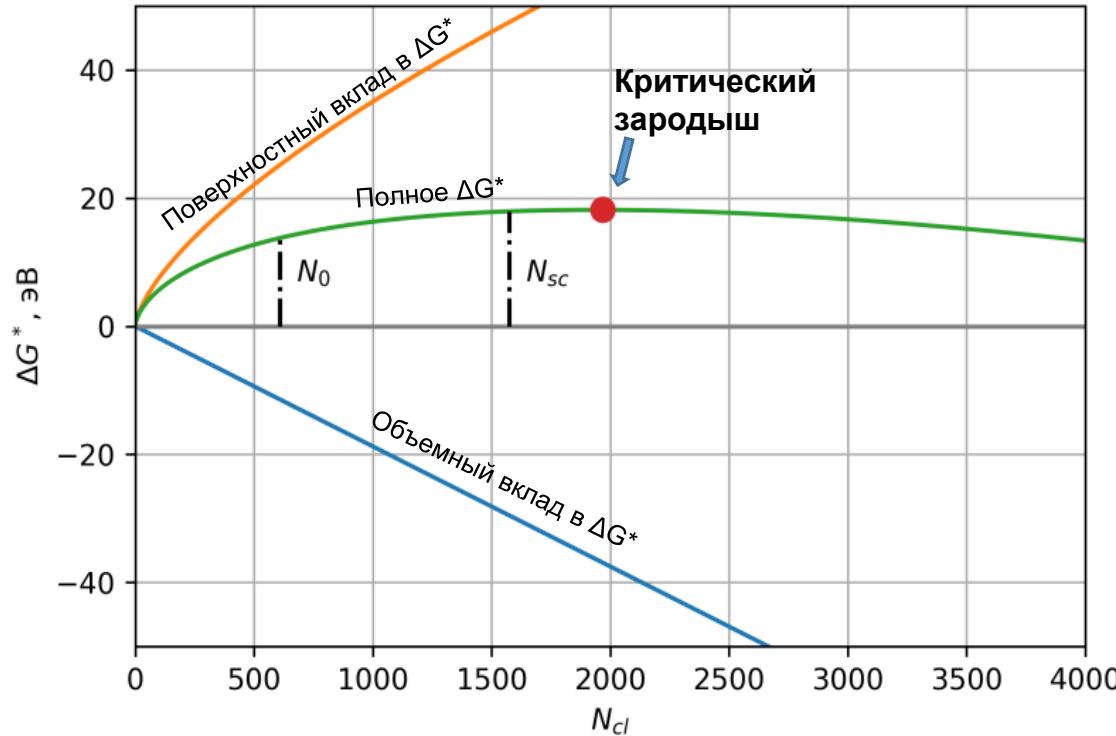
Воздействие ультразвука на расплав



Гомогенная нуклеация под
действием ультразвука ?

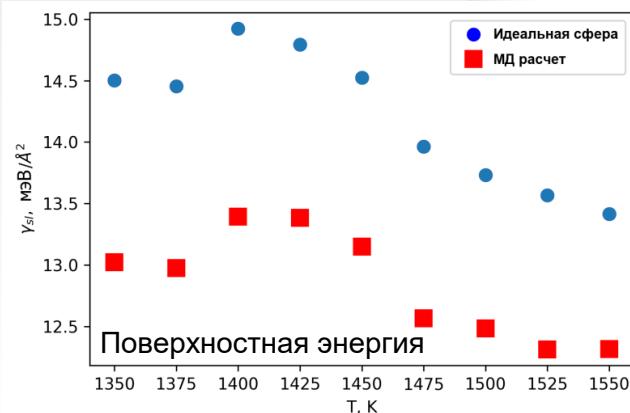
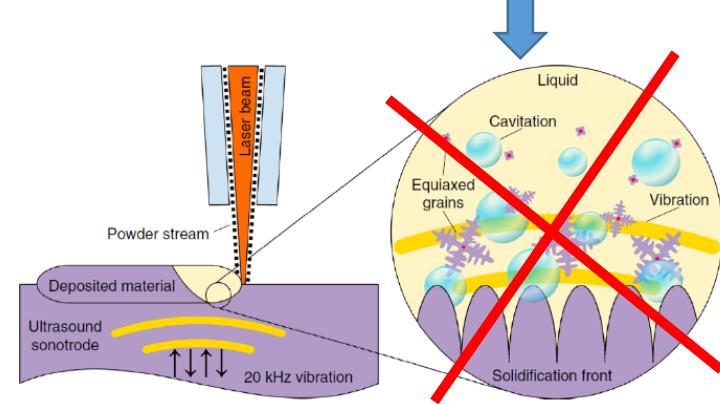
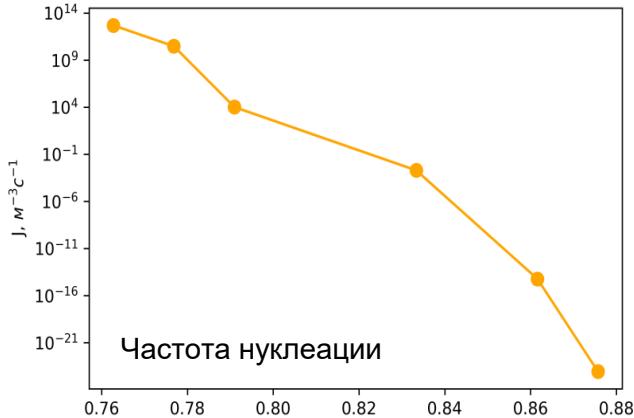
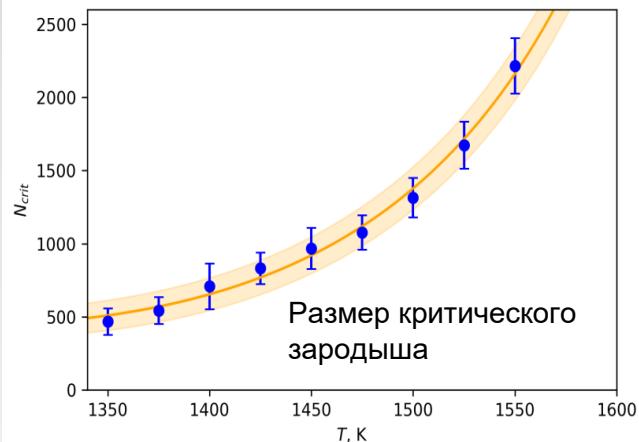


Критический зародыш

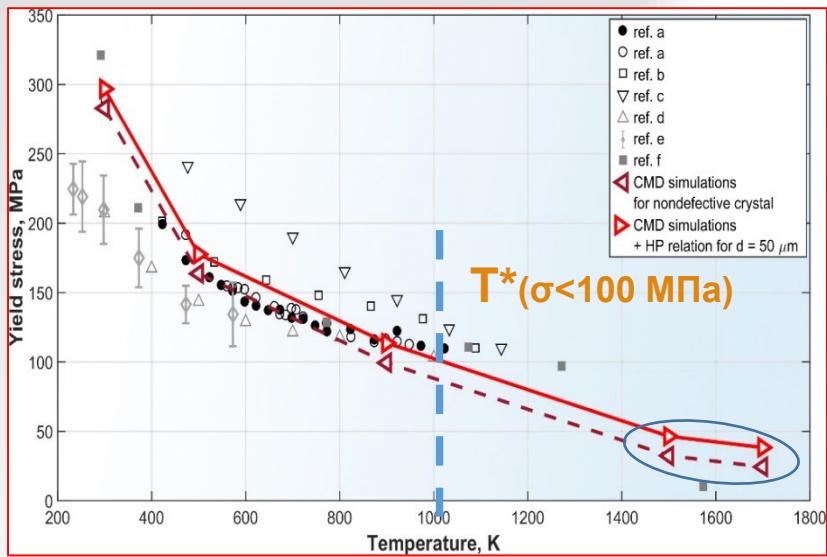


Зависимость изменения энергии Гиббса от размера зародыша при фиксированной температуре

Воздействие ультразвука на расплав



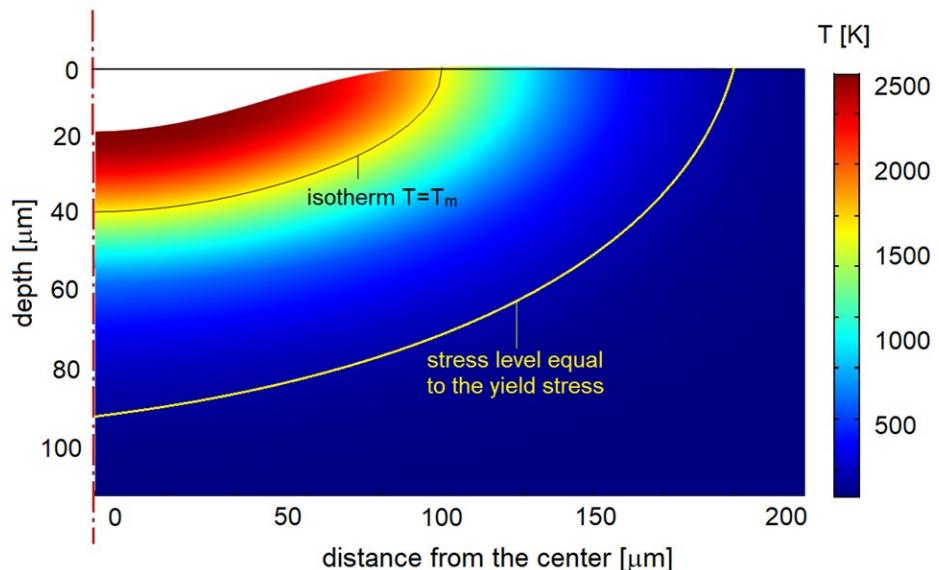
Воздействие на затвердевший материал. Расчет зависимости предела текучести стали от температуры



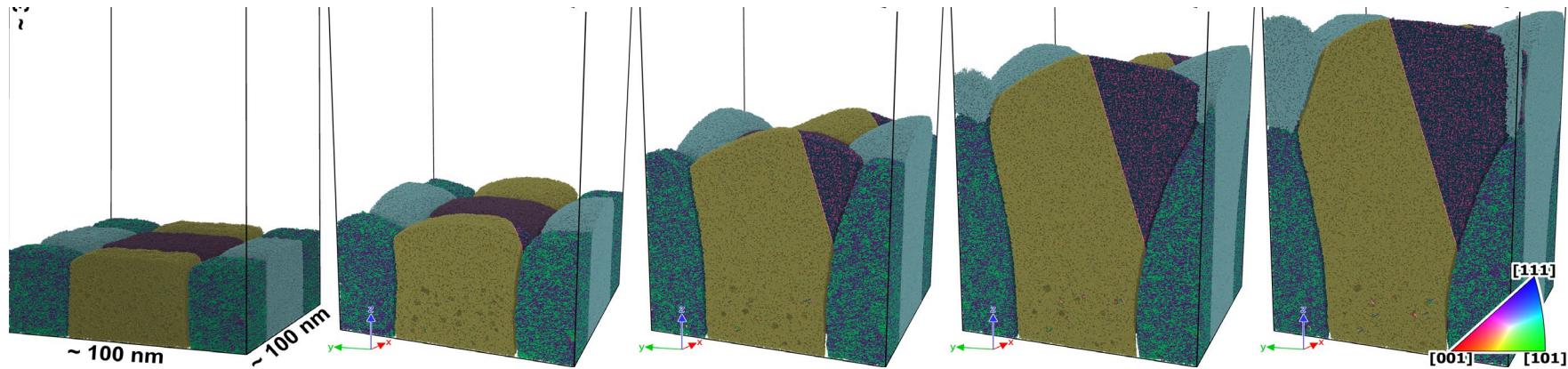
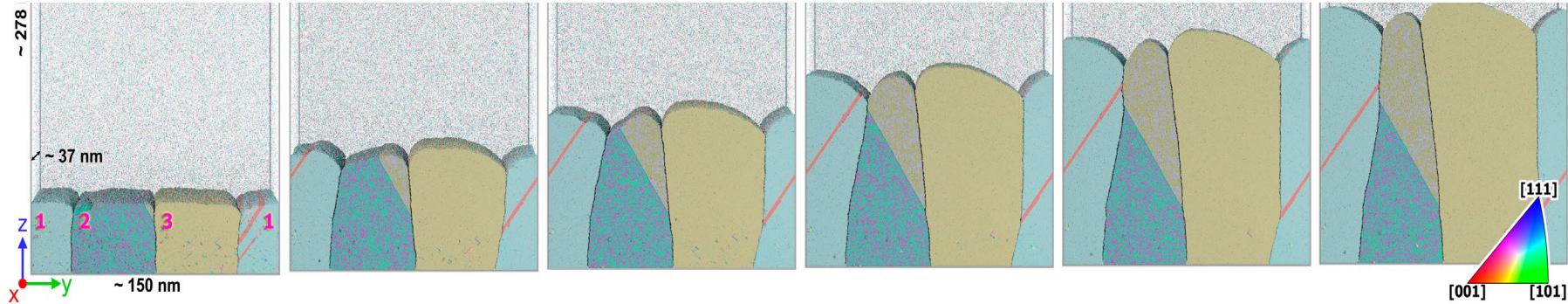
Scientific Reports, 11,
(2021) 23501.



Из-за резкого падения предела текучести с температурой существует область твердого материала вблизи фронта кристаллизации, в которой предел текучести оказывается меньше напряжений в акустической волне

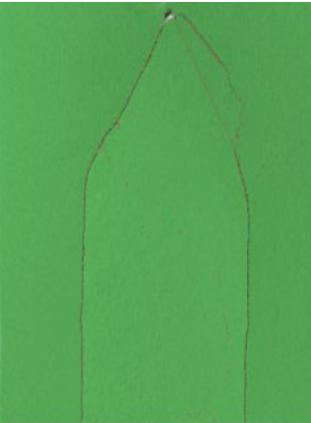
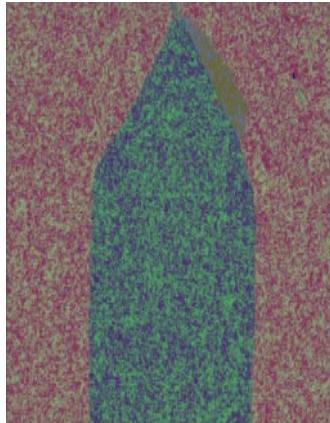


Воздействие на затвердевший материал. Прямое моделирование кристаллизации.

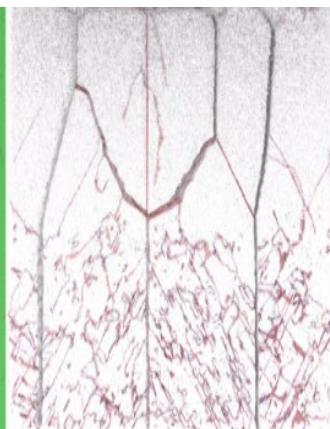
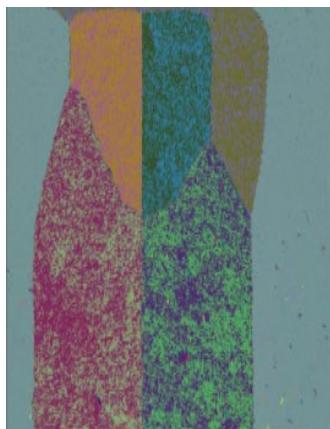


Воздействие на затвердевший материал. Прямое моделирование кристаллизации.

Направление кристаллизации



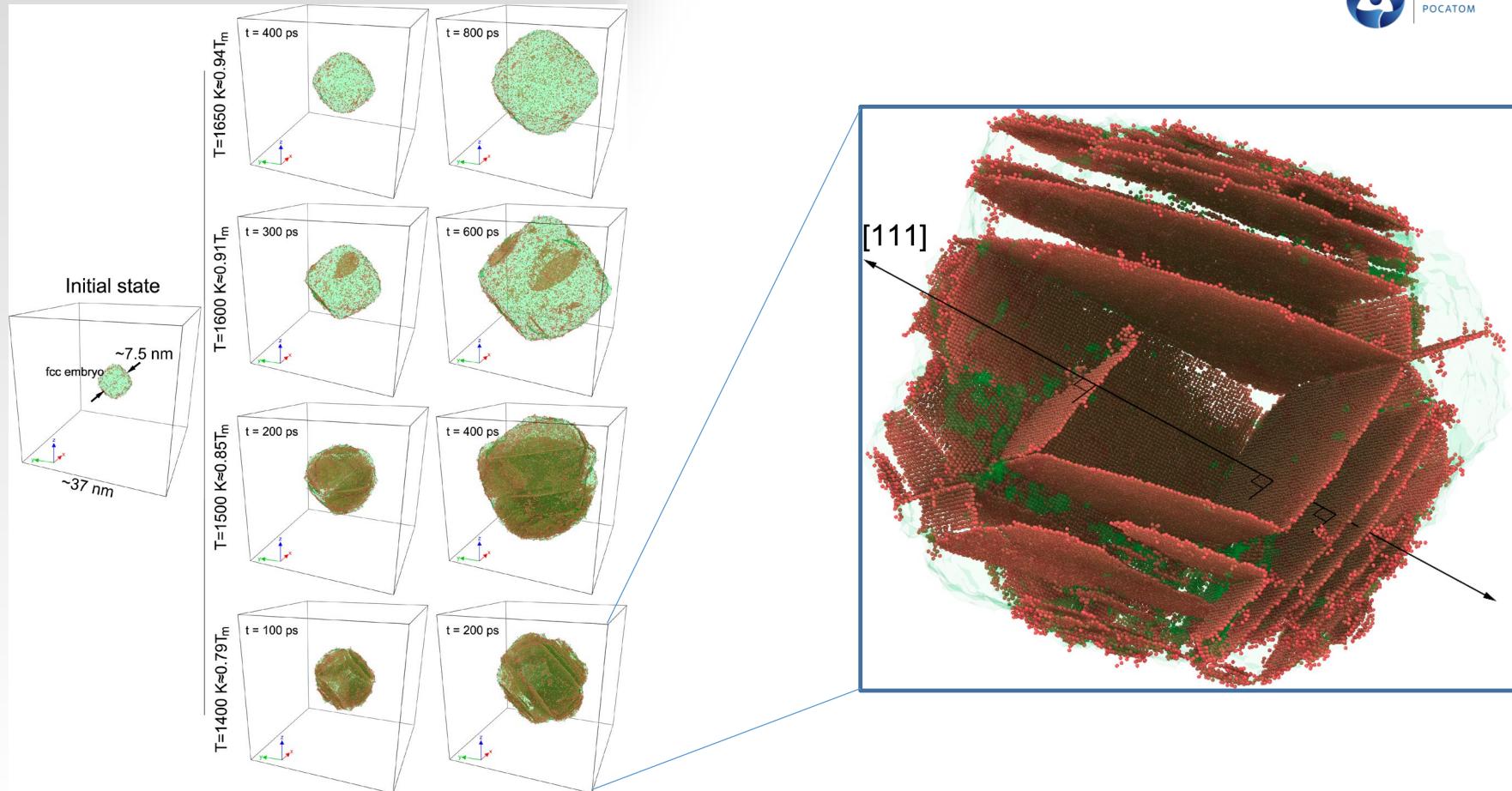
Финальная структура без
акустического воздействия



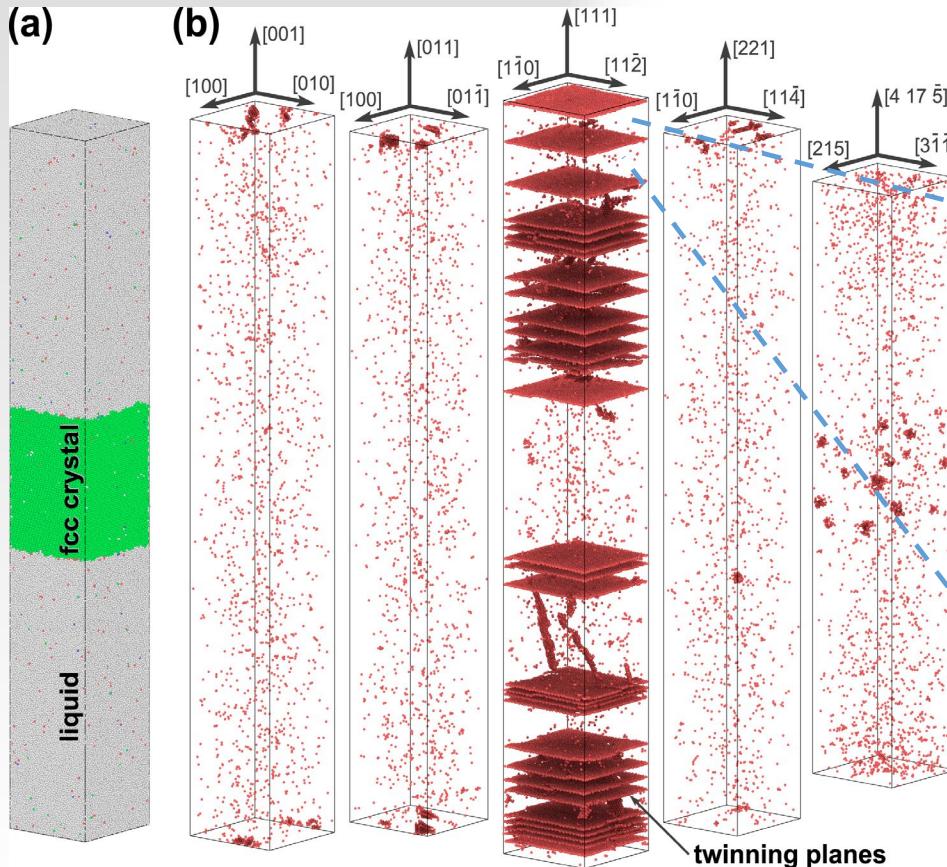
Финальная структура при
акустическом воздействии с
амплитудой ~100 МПа

Эффект от пластической
деформации ультразвуком
нужно признать **сильным**

Кристаллизация изолированного зародыша



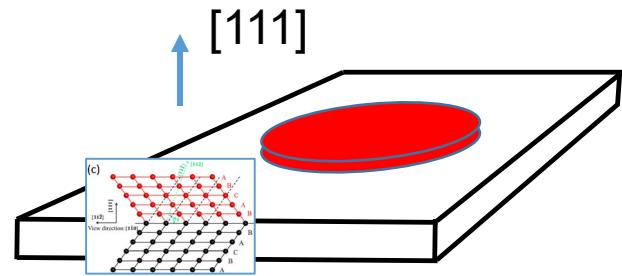
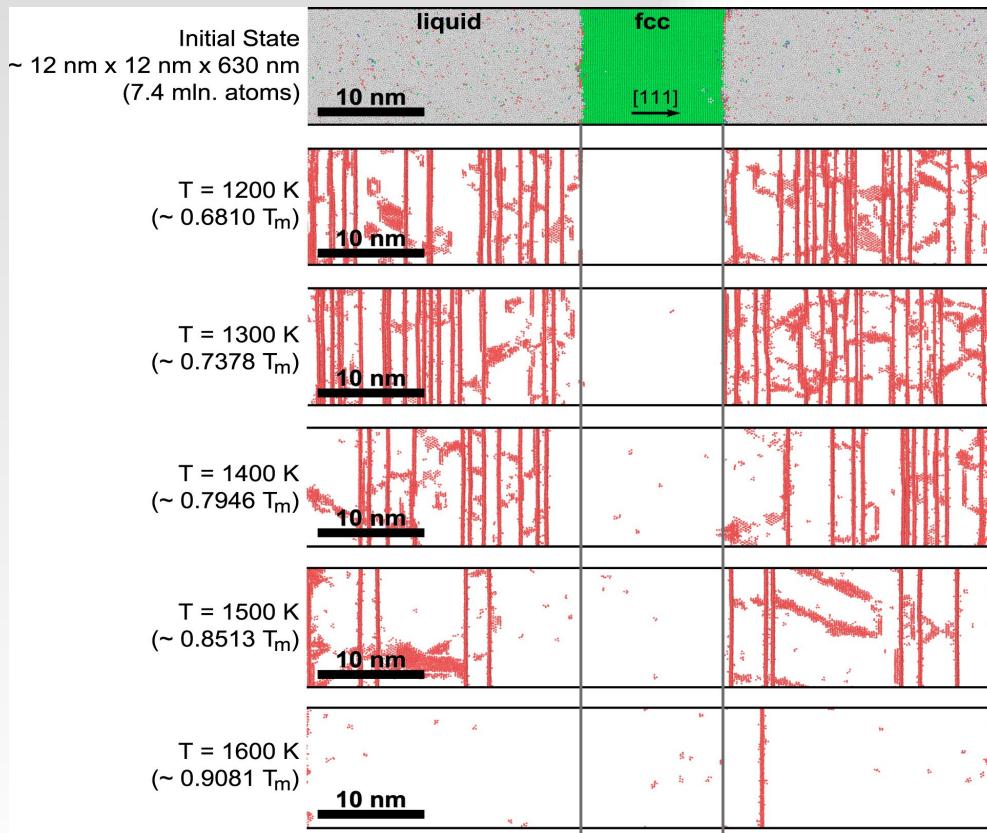
Кристаллизация в различных кристаллографических направлениях



$$T = 1300K = 0.7378T_m$$

Атомная структура двойника

Образование плоскостей двойникования

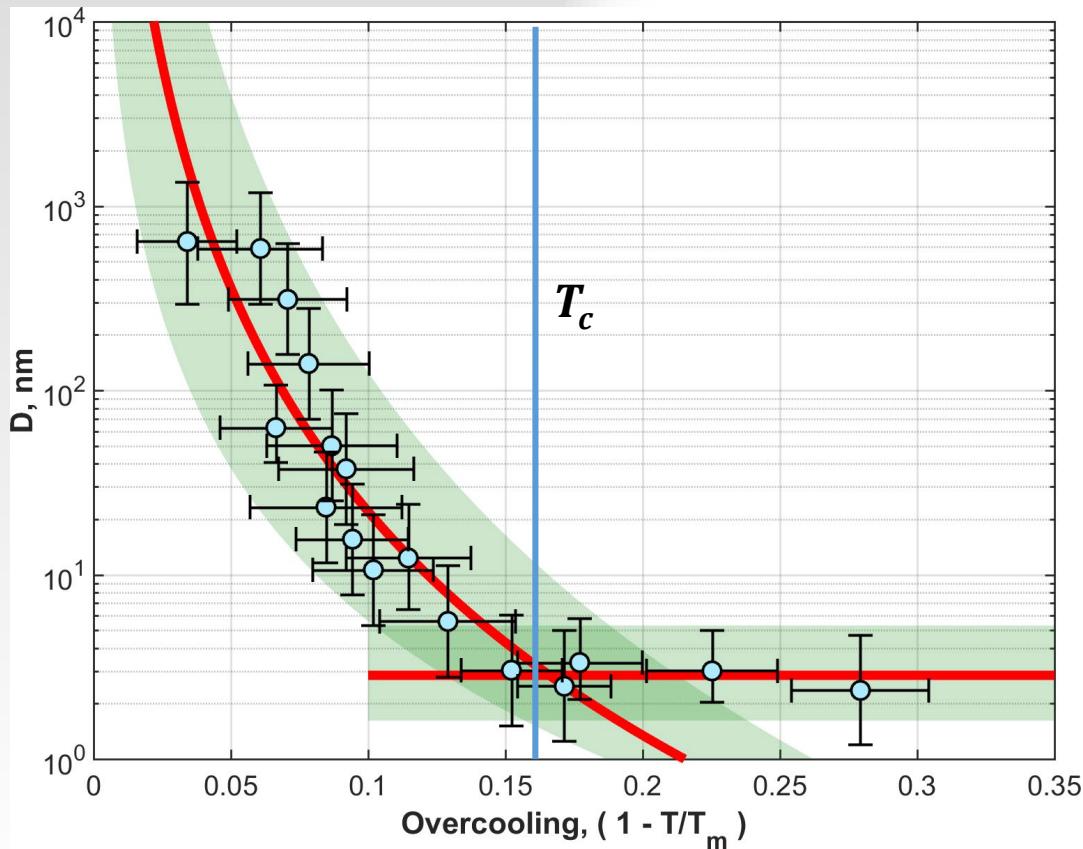


$$T_c \approx T_m \left(1 - \frac{\gamma_{twin}}{\Delta H f h} \right)^*$$

$$T_c \approx 0.86 T_m$$

*ACS Nano 2016, 10,
6995–7007

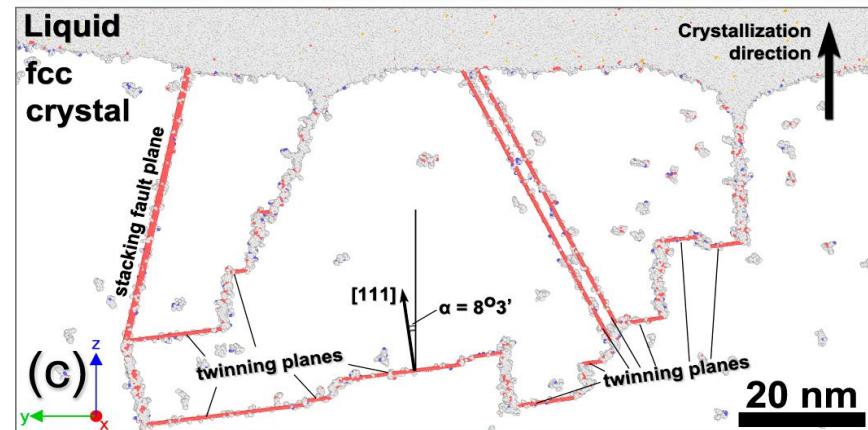
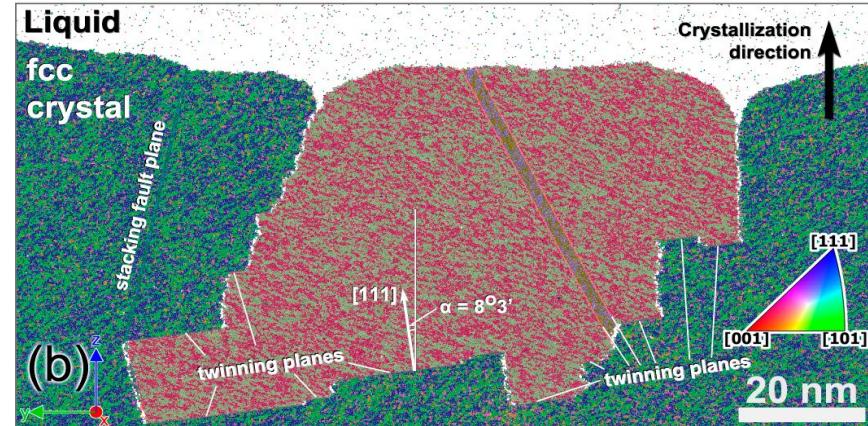
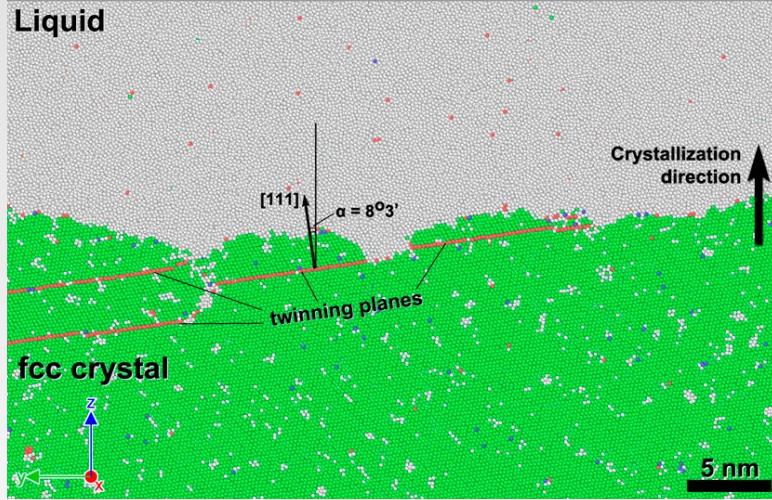
Размер двойников в зависимости от температуры



$$T_c \approx T_m \left(1 - \frac{\gamma_{twin}}{\Delta H f h} \right)$$

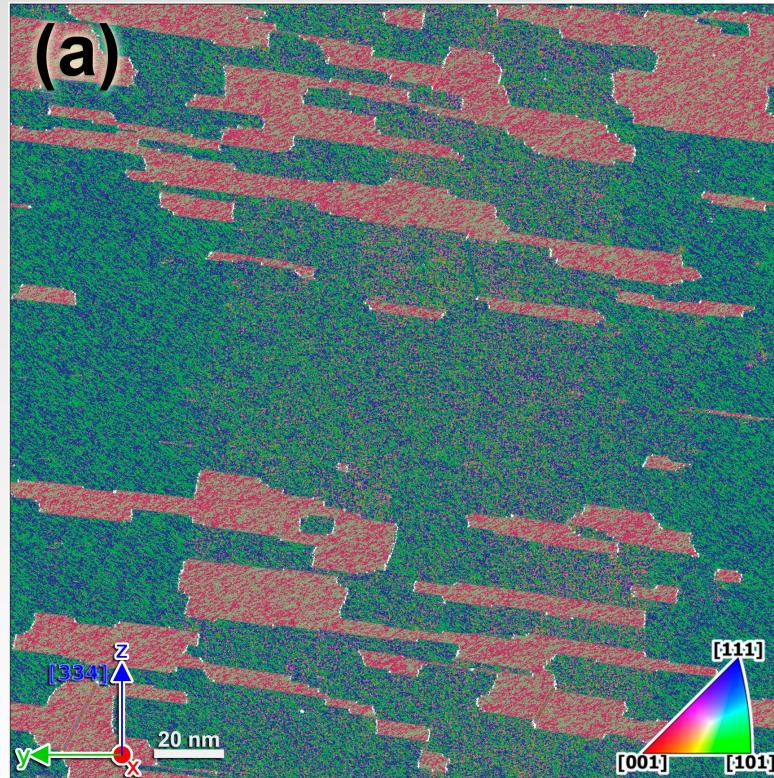
$$T_c \approx 0.86 T_m$$

Формирование первичной микроструктуры

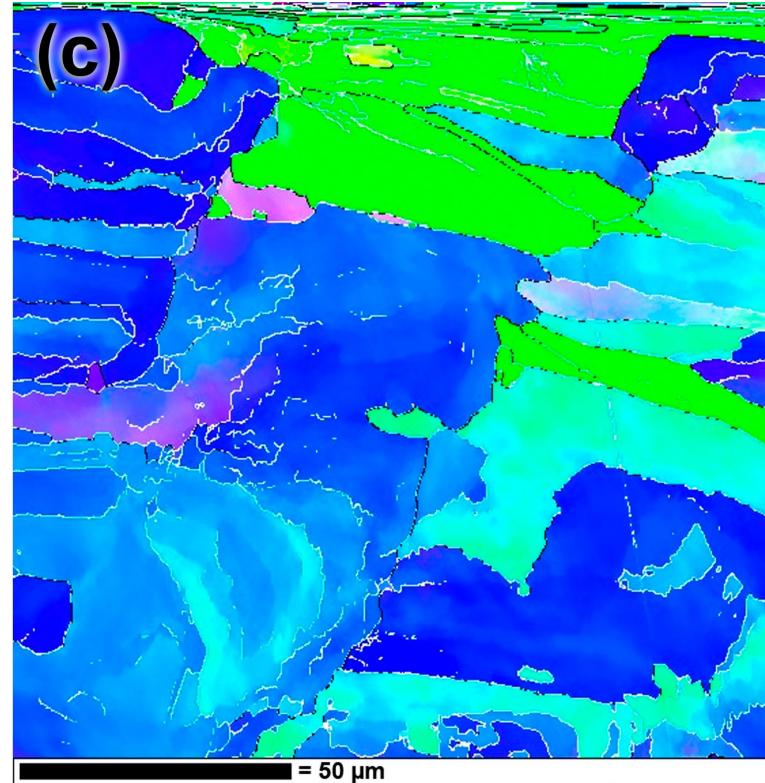


Формирование первичной микроструктуры

МД

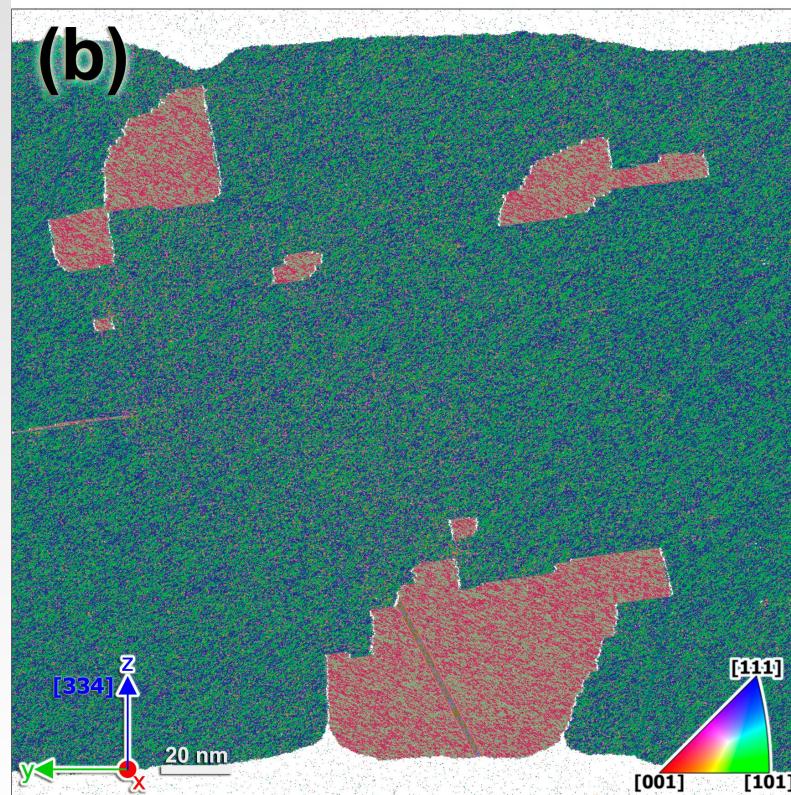


Эксп.

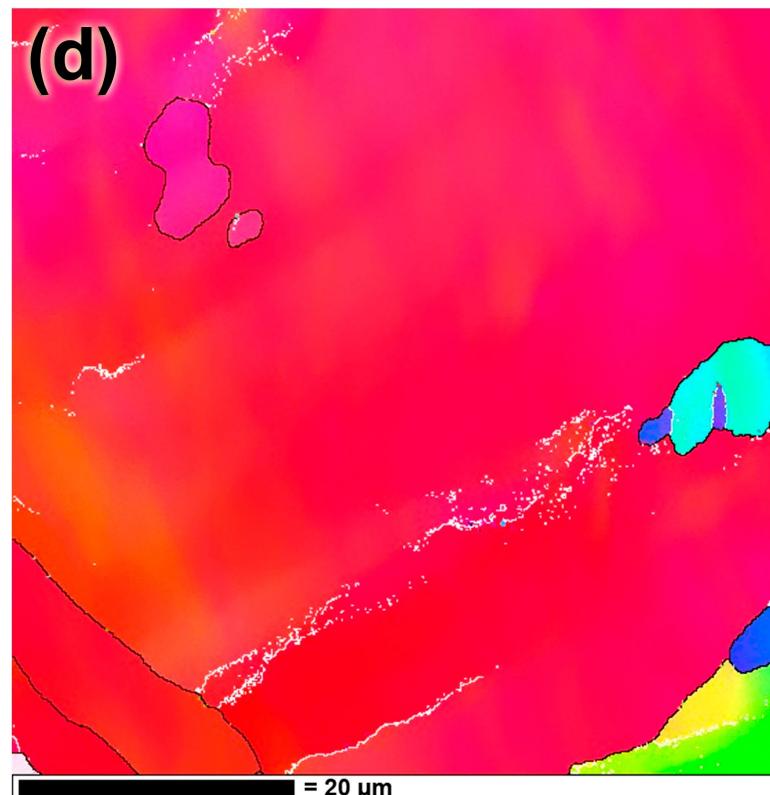


Формирование первичной микроструктуры

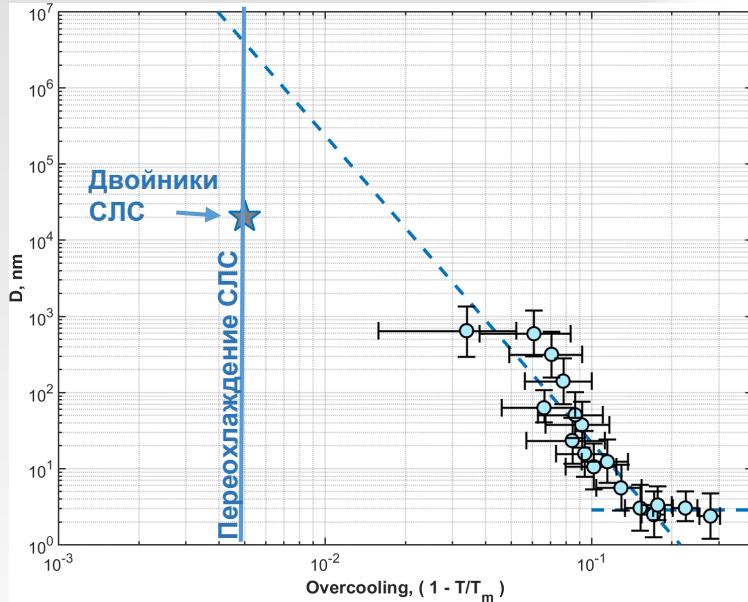
МД



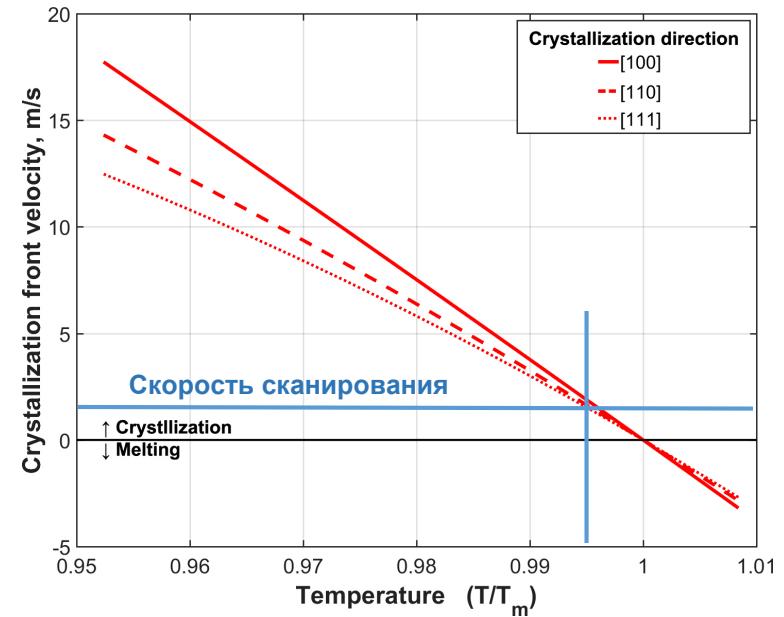
Эксп.



Формирование первичной микроструктуры

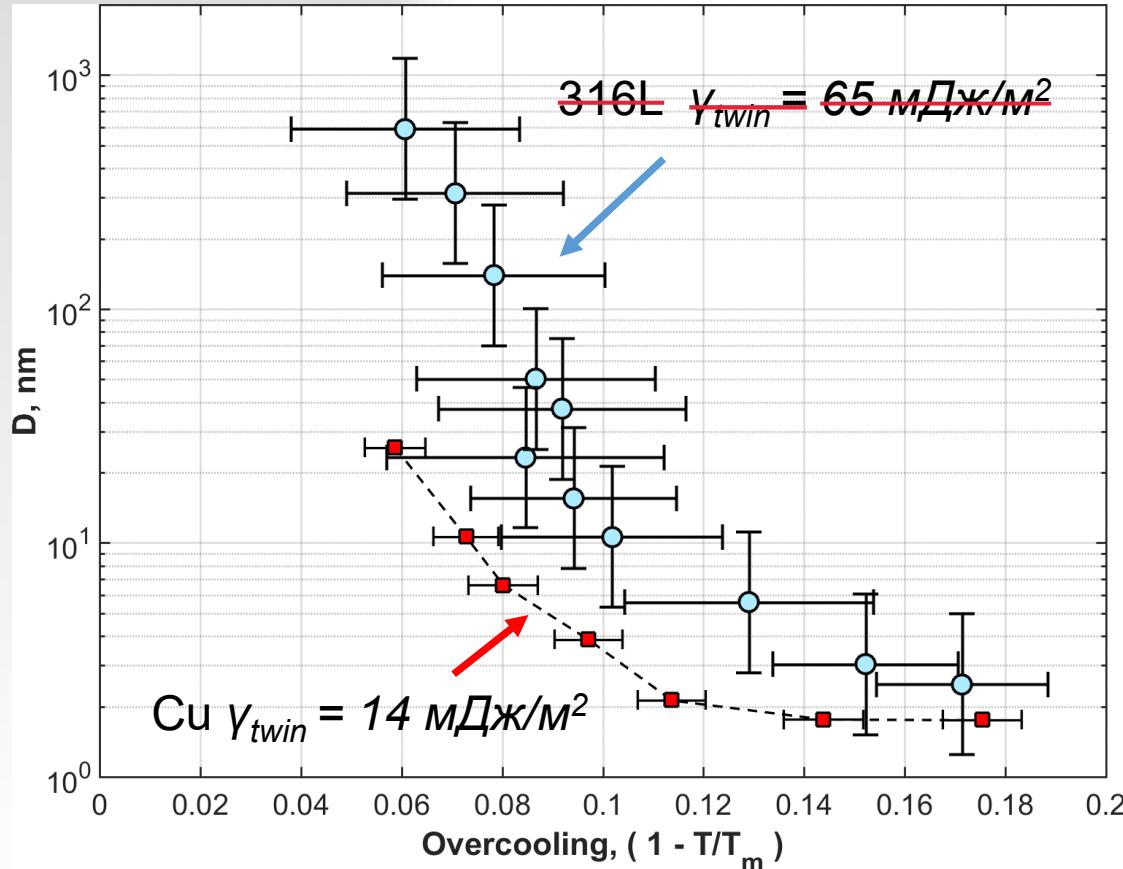


Размер двойников в зависимости от переохлаждения

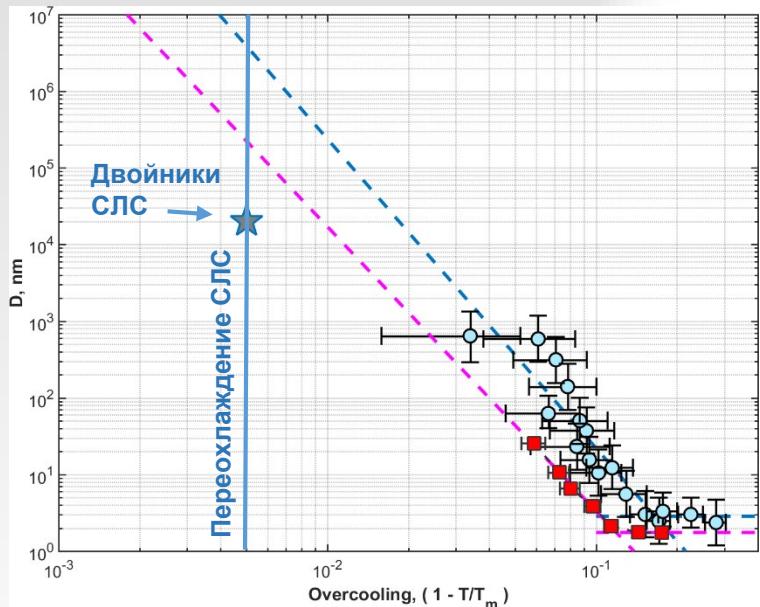


Скорость кристаллизации в зависимости от переохлаждения

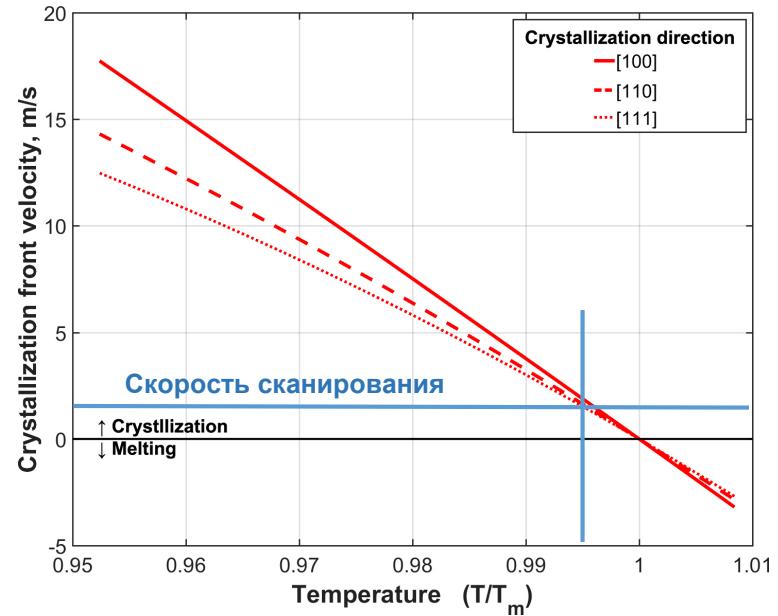
Размер двойников в зависимости от температуры и γ_{twin}



Формирование первичной микроструктуры

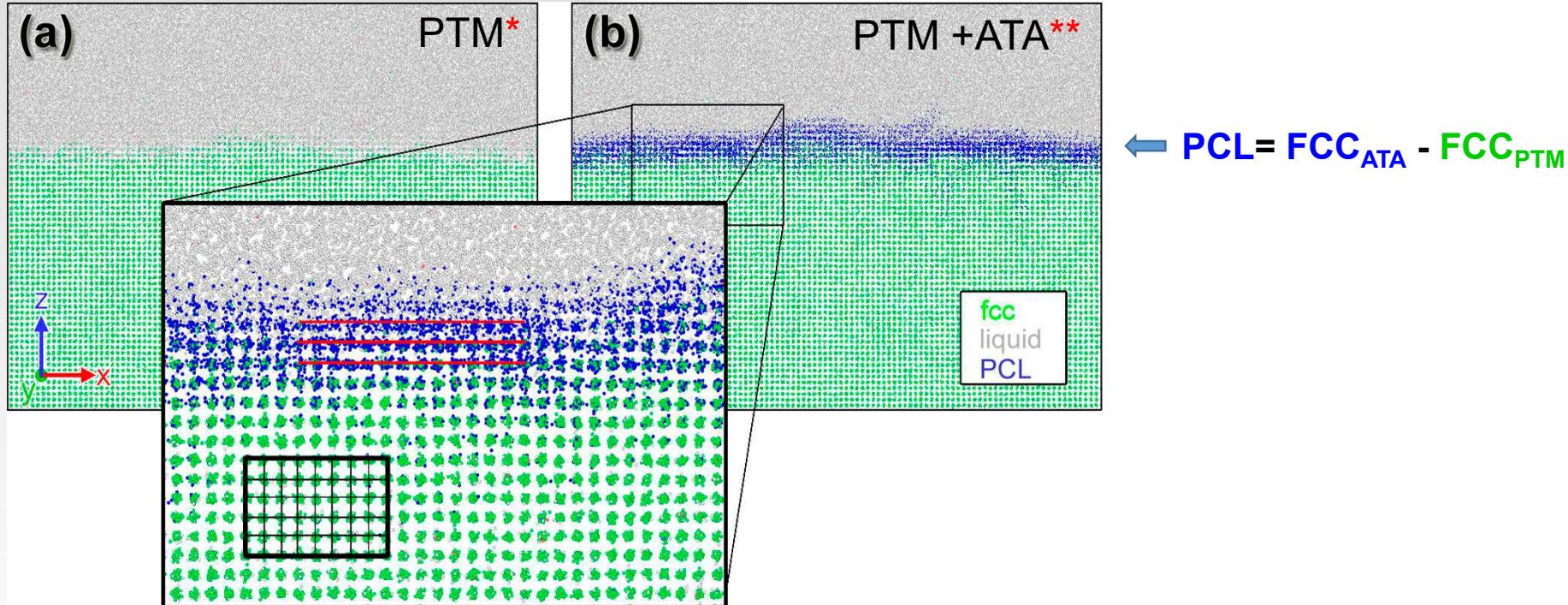


Размер двойников в зависимости от переохлаждения



Скорость кристаллизации в зависимости от переохлаждения

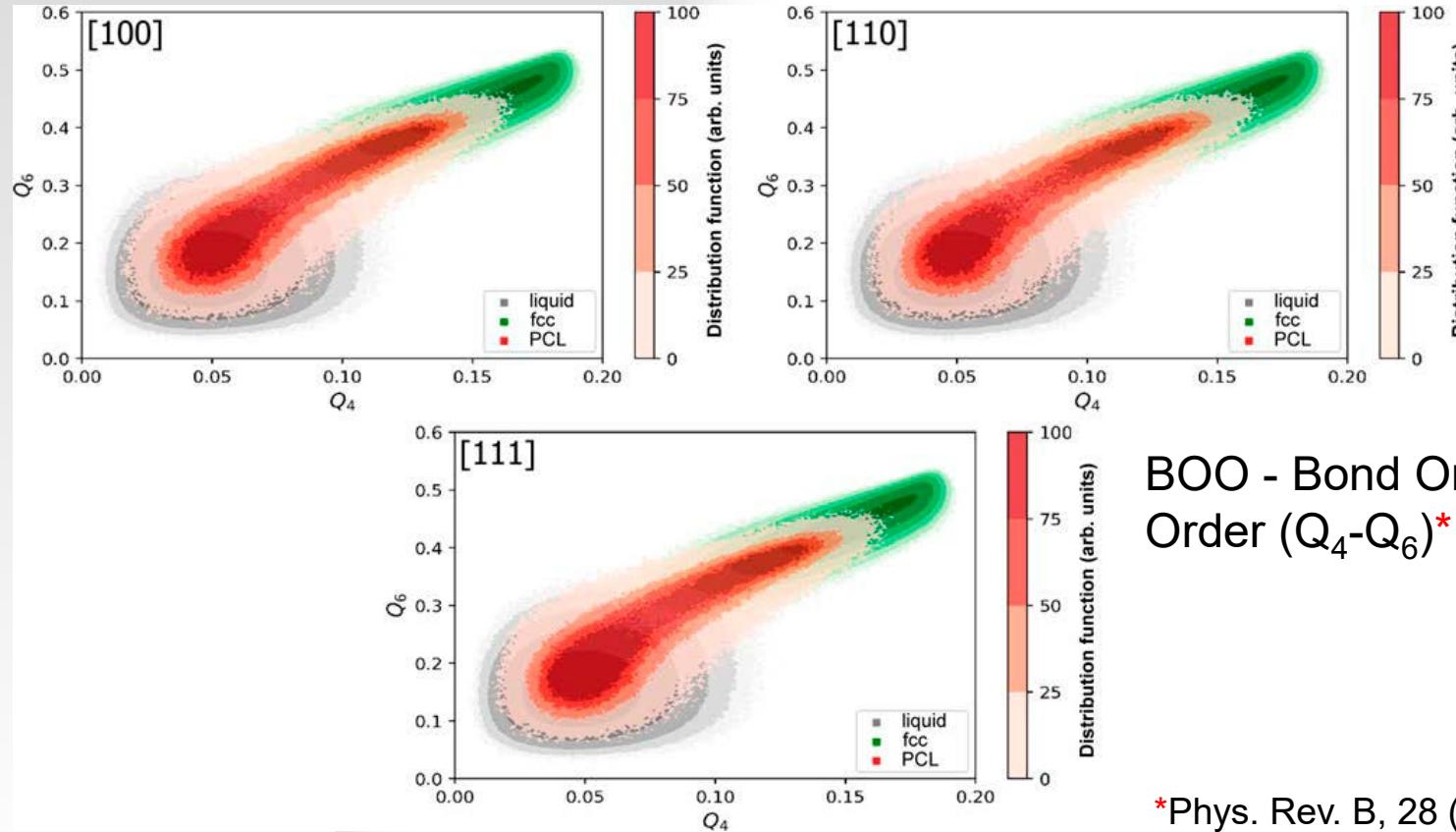
Выделение предкристаллизационного слоя (PCL)



* PTM - Polyhedral Template Matching

** ATA – Adaptive Template Analysis

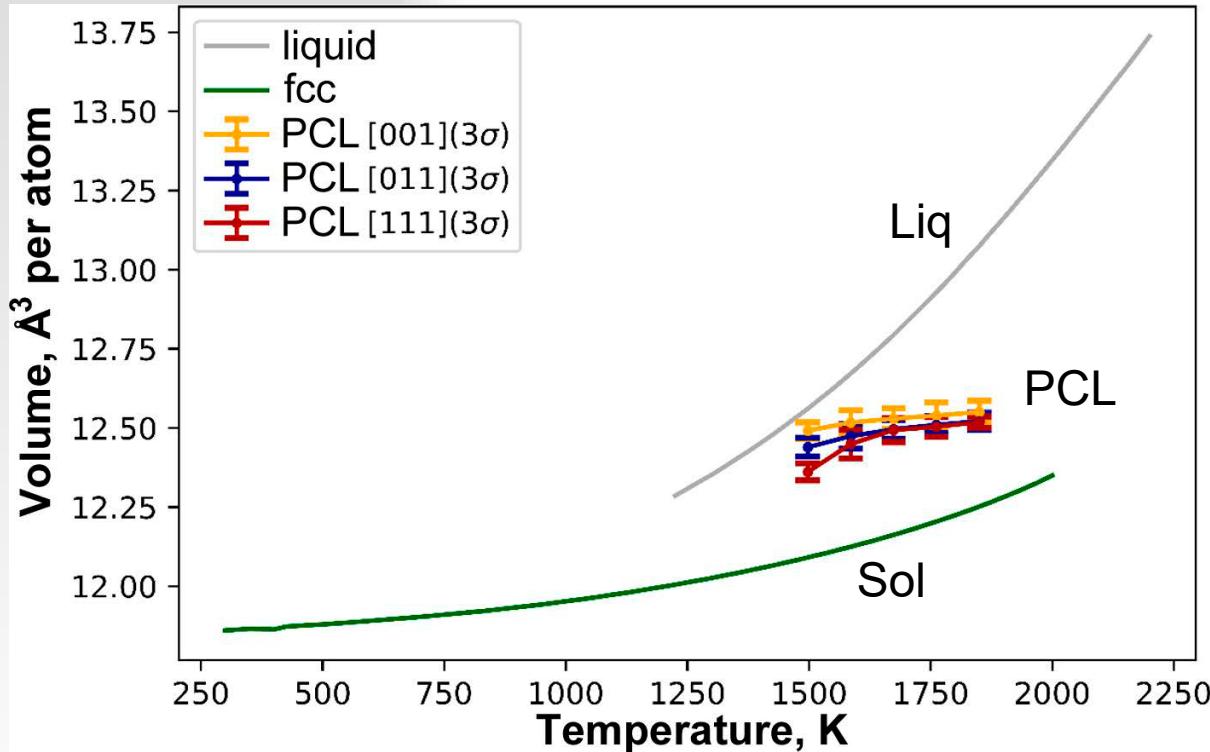
Выделение предкристаллизационного слоя (PCL)



BOO - Bond Orientational Order (Q_4 - Q_6)*

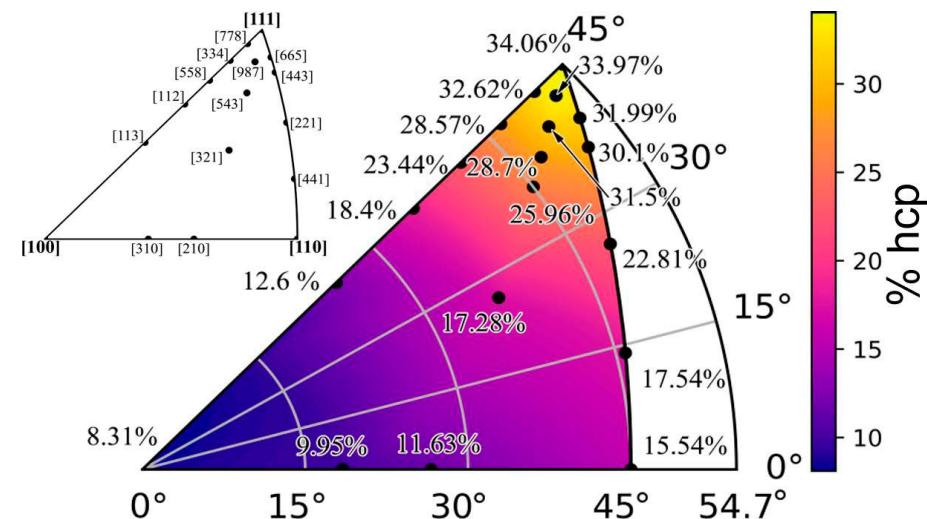
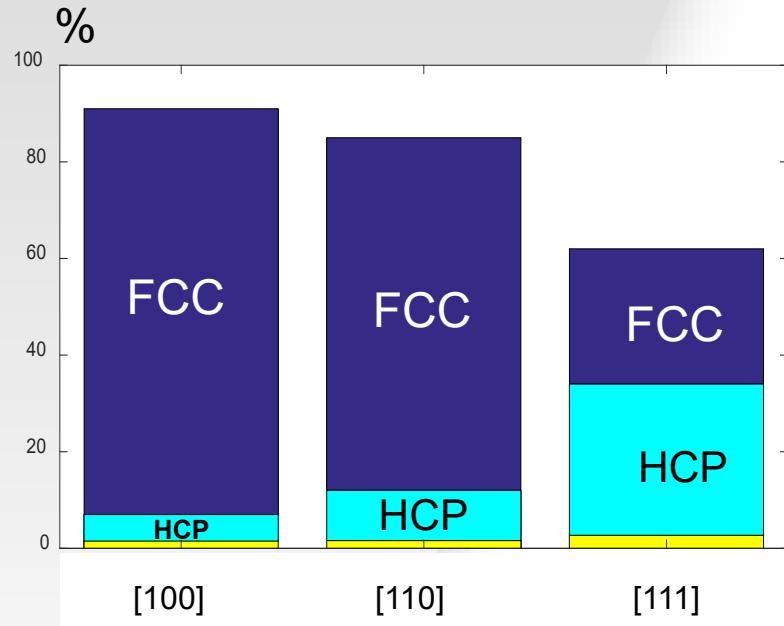
*Phys. Rev. B, 28 (1983) 784–805 23

Выделение предкристаллизационного слоя (PCL)



Зависимость удельного объема от температуры

Структура предкристаллизационного слоя

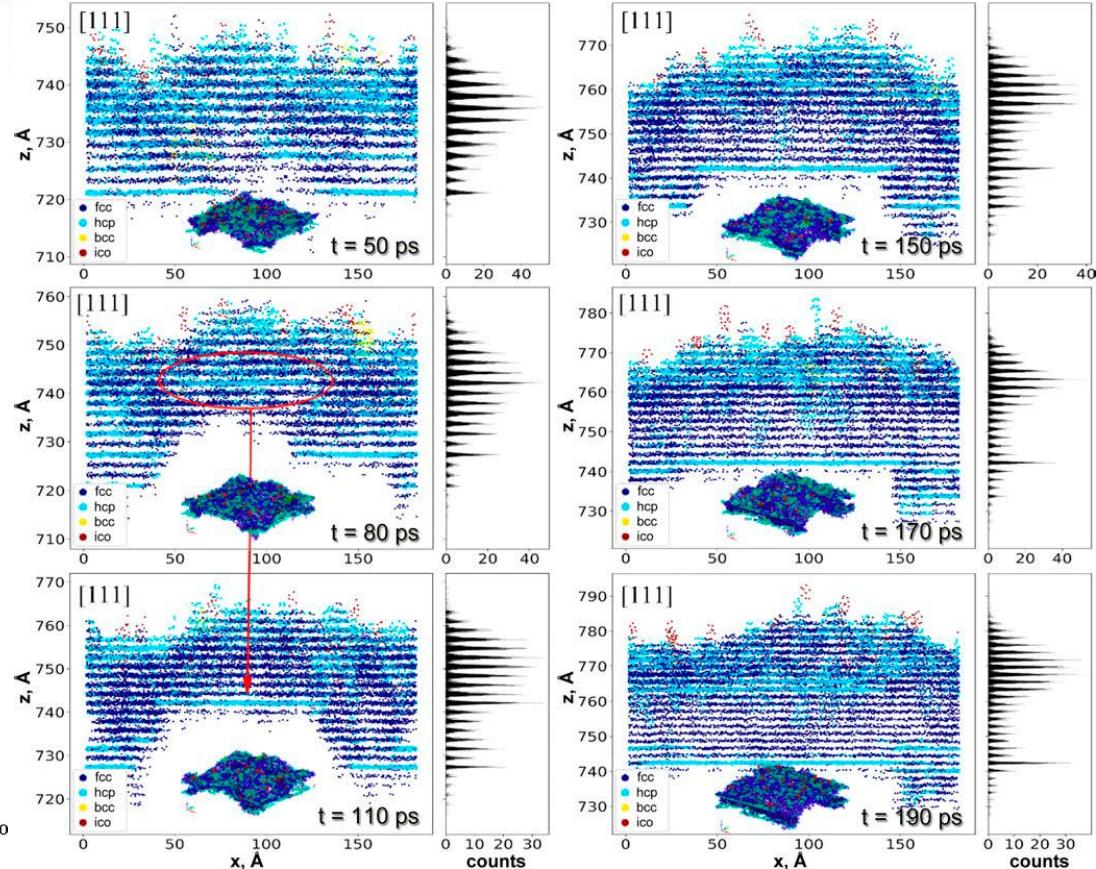
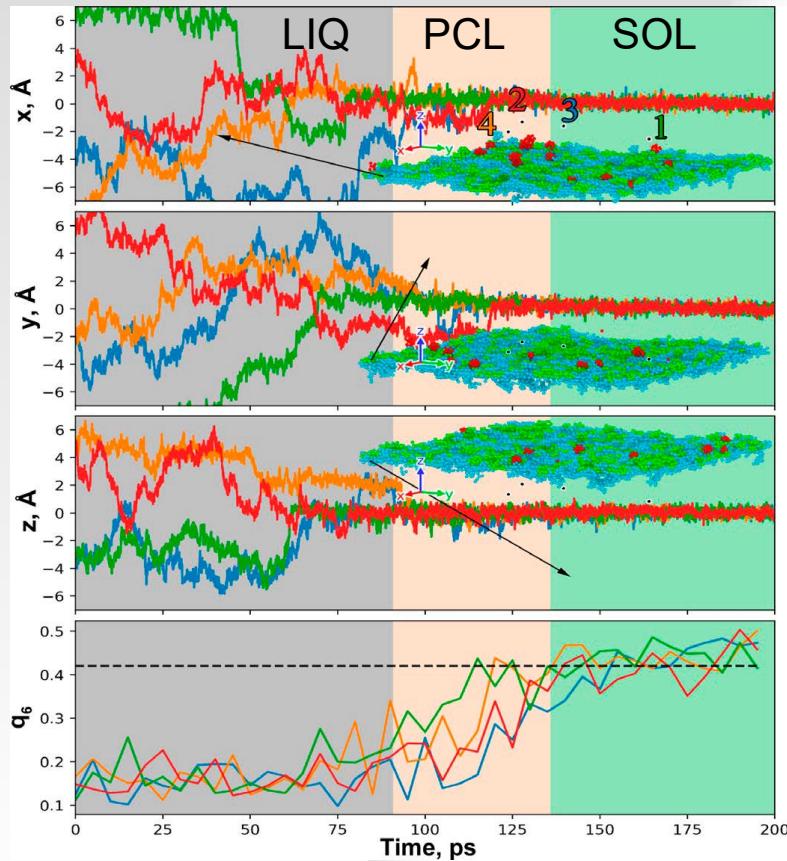


Процентное содержание различных структур в PCL в зависимости от ориентации

Эволюция предкристаллизационного слоя



РФАЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

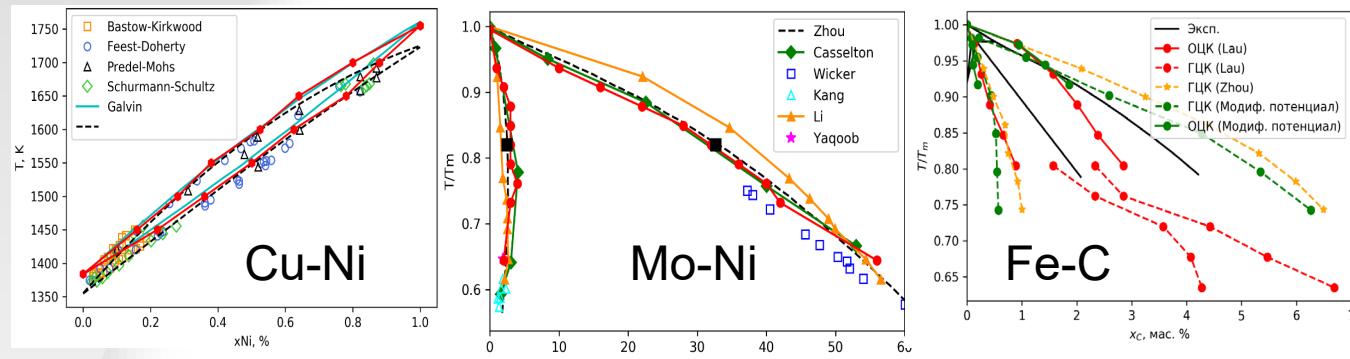


Заключение

- Современные методы молекулярной динамики позволяют проводить моделирование формирования первичной микроструктуры при условиях, свойственных СЛС;
- Рассмотренное импульсное воздействие (внешний ультразвук или импульсный лазер) приводит к изменению микроструктуры образцов, полученных методом СЛС, за счет пластического деформирования материала, находящегося в тонком слое под ванной расплава;
- Получены убедительные свидетельства существования предкристаллизационного слоя (PCL), обобщающего понятие поверхности раздела твердое тело – жидкость;
- Изучены структурные свойства PCL и их зависимость от направления кристаллизации;
- Показана роль PCL в формировании первичной двойниковой микроструктуры при быстрой кристаллизации.

Направления дальнейших исследований (или что осталось за кадром?)

1) Моделирование затвердевания сплавов с учетом солидуса и ликвидуса



2) Моделирование ликвации

