

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПЕРВИЧНОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ ПРИ БЫСТРОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛОВ

*В. В. Дремов¹, А. В. Караваев¹, Р. М. Кичигин¹, П. В. Чирков¹, Е. Б. Черепецкая²,
В. В. Чеверикин², В. С. Дуб³, И. А. Иванов^{2,3}, С. В. Салихов²*

¹ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

²НИТУ «МИСИС», Москва, Россия

³НПО «ЦНИИТМАШ», Москва, Россия

При аддитивном производстве металлических деталей методом Селективного Лазерного Сплавления (СЛС) реализуются высокие температурные градиенты и малый объем ванны расплава, что делает масштаб процессов близким возможностям современных методов атомистического моделирования. В работе методом атомистического моделирования исследуются микроскопические механизмы, ответственные за формирование первичной микроструктуры при быстрой кристаллизации расплава [1]. В качестве материала исследования выбрана нержавеющая сталь 316L, которая широко используется в СЛС. Показано, что затвердевший материал наследует дефекты подложки и приобретает новые, которые взаимодействуют с фронтом кристаллизации, что в результате формирует первичную микроструктуру. В статье рассмотрены особенности кристаллизации в различных кристаллографических направлениях, взаимодействие фронта кристаллизации с границами зерен (наследуемыми от подложки) и вновь образующимися дефектами (границами двойников), а также особенности формирования последних. Результирующая микроструктура виртуальных образцов была сопоставлена с микроструктурой реальных образцов, полученных методом СЛС и исследованных методом EBSD. Сравнение показало схожесть EBSD образов и, таким образом, способность молекулярно-динамического моделирования воспроизводить основные особенности микроструктуры при СЛС.

Расчеты показали образование множественных плоскостей двойникового при кристаллизации в направлении [111]. Средний размер двойников определяется степенью переохлаждения – чем ближе температура кристаллизации к равновесной температуре плавления, тем больше характерный размер.

Моделирование также показало роль двойникового в изменении геометрии фронта кристаллизации и формировании первичной микроструктуры. Сравнение микроструктуры виртуальных и реальных образцов представлено на рис. 1. Из рисунка видно, что субзеренная микроструктура напечатанных образцов схожа с микроструктурой виртуальных образцов, принимая во внимание различие масштабов, связанное со скоростью кристаллизации.

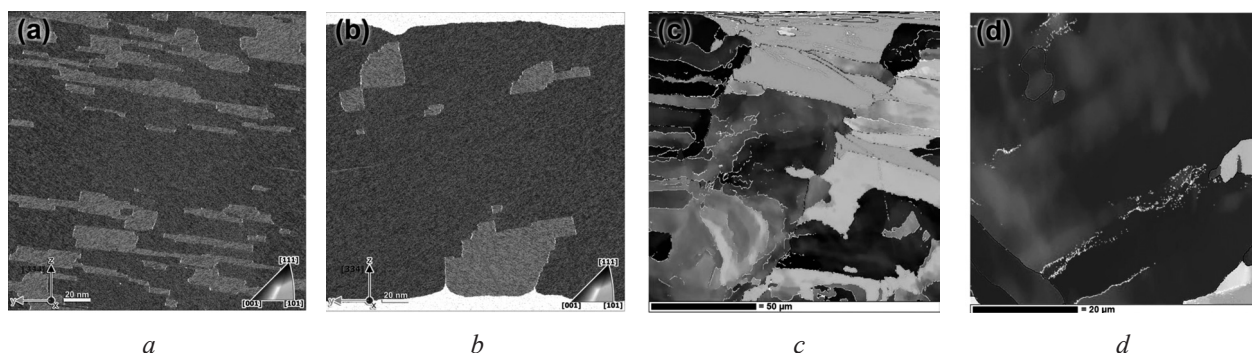


Рис. 1. Двойниковая микроструктура закристаллизовавшихся образцов (EBSD анализ).

a, b – результаты молекулярно-динамического моделирования; *c, d* – EBSD реальных образцов, полученных при СЛС.

a, c – высокая скорость кристаллизации; *b, d* – низкая

Литература

1. **Dremov, V. V.** Atomistic simulation of primary microstructure formation in metals during crystallization from the melt [Text] / V. V. Dremov et al. // Sci. Rep. 2024. – Vol. 14. – P. 28105.