

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЧНОСТИ ОЦК СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

Р. М. Кичигин, П. В. Чирков, В. В. Дремов, А. В. Караванов

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

Статические прочностные свойства конструкционных материалов имеют определяющее значение для анализа надежности машин и механизмов в условиях эксплуатации. Они играют ключевую роль при анализе реакции конструкций на различные термомеханические нагрузки. Механические и инженерные характеристики конструкционных материалов, такие как предел текучести, предел прочности, пластичность во многом определяются, в отличие, например, от модулей упругости, их микроструктурой (различными дефектами, присутствующими в материалах).

Безусловный практический интерес с точки зрения количественного атомистического описания механизмов упругопластической деформации представляют широко используемые в промышленности ферритные и феррито-мартенситные стали. Одним из рассматриваемых факторов, значительно влияющих на статические прочностные свойства ферритных сталей, является образование вторичных фаз. Образование выделений вторичных фаз из-за пересыщенности твердого раствора легирующими и примесными элементами может быть вызвано как термическим нагружением при эксплуатации при повышенных температурах, так и в результате облучения конструкционных сталей продуктами ядерных реакций. Другим элементом, также определяющим механические свойства ферритных сталей, является углерод, а именно его количество и распределение в материале. При малых концентрациях, характерных для сталей, углерод является примесью внедрения. При этом он обладает достаточной подвижностью в ОЦК решетке ферритных сталей для того, чтобы моделировать его динамику в прямых атомистических расчетах.

Прямое атомистическое моделирование статических прочностных свойств реальных материалов является нетривиальной задачей в силу того, что типичные временные масштабы, доступные для прямого моделирования в рамках Классической Молекулярной Динамики (КМД) за разумное время, не превосходят сотен наносекунд. Это означает, что прямое КМД моделирование деформации материала при постоянных скоростях деформации может быть выполнено только для режимов с весьма большими скоростями деформации, при которых предел текучести и другие механические прочностные характеристики определяются микроскопическими механизмами, отличными от доминирующих при низких (квазистатических) скоростях деформации.

В настоящей работе для определения статических прочностных характеристик сталей использован КМД метод моделирования, предложенный и развитый в работах [1–3]. Метод основан на атомистическом моделировании релаксации сдвигового напряжения в специально сконструированных КМД образцах определенной геометрии с внедренными дислокациями. Предлагаемый подход позволяет получать зависимость скорости скольжения дислокаций от величины приложенного сдвигового напряжения при интересующих условиях, включая ветвь торможения на фоновых и участок линейного изменения скорости дислокаций с изменением напряжения. Кроме того, метод позволяет оценивать напряжение, при котором происходит остановка дислокаций, то есть оценивать напряжение Пайерлса и рассчитывать оценку квазистатического предела текучести. Возможности методики, а также ее проверка на обширных экспериментальных данных продемонстрированы для различных материалов, таких как чистые металлы [1], ГЦК-сплавы $Pu-Ga$ [2–3], аустенитные $Fe-Ni-Cr$ стали [4].

В работе [5] продемонстрировано применение данного метода расчета предела текучести в рамках КМД моделирования к ферритно-мартенситным и перлитным сталям, подвергнутым радиационному облучению с выделением вторичных фаз (преципитатов). В [5] рассматривались модельные преципитаты когерентные с основной ОЦК матрицей полностью состоящие из легирующего элемента. В настоящей работе представлены результаты моделирования с преципитатами максимально приближенными по морфологии к реально наблюдаемым в экспериментах. В настоящей работе также продемонстрировано применение данного подхода для КМД расчета предела текучести ферритных сталей с учетом реального содержания и распределения углерода.

Литература

1. **Karavaev, A. V.** Atomistic modeling of the dislocation dynamics and evaluation of static yield stress [Text] / A. V. Karavaev et al. // EPJ Web of Conf. – 2015. – Vol. 94. – P. 04007.
 2. **Karavaev, A. V.** Atomistic simulations of dislocation dynamics in δ -Pu-Ga alloys [Text] / A. V. Karavaev et al. // J. Nucl. Mater. – 2017. – Vol. 496. – P. 85.
 3. **Karavaev, A. V.** Shear strength of nanocrystalline δ -phase Pu-Ga alloys: Atomistic simulations [Text] / A. V. Karavaev et al. // J. Nucl. Mater. – 2019. – Vol. 524. – P. 149.
 4. **Ivanov, I. A.** Effect of laser-induced ultrasound treatment on material structure in laser surface treatment for selective laser melting applications [Text] / I. A. Ivanov et al. // Sci. Rep. – 2021. – Vol. 11. – P. 23501.
 5. **Karavaev, A. V.** Atomistic simulation of hardening in bcc iron-based alloys caused by nanoprecipitates [Text] / A. V. Karavaev et al. // Comp. Mater. Sci. – 2023. – Vol. 229. – P. 112383.
-