



ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТА AL-MG, ПОЛУЧЕННОГО В РЕЗУЛЬТАТЕ ДЕФОРМАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ

Пухачева Юлия Александровна

магистрант, Уфимский Университет Науки и Технологий,
РФ, г. Уфа

Баимова Юлия Айдаровна

научный руководитель, д-р физ.-мат. наук, проф., Институт проблем
сверхпластичности металлов,
РФ, г. Уфа

В настоящее время актуальные направления исследований связаны с разработкой новых материалов, обладающих улучшенными механическими характеристиками. Одним из таких направлений являются композиты на основе алюминия (Al), в частности Al-Mg, Al-Ti, Al-Cu и Al-Nb. Подобные композиты можно получить при кручении под квазигидростатическим давлением [1, 2]. В данной работе исследован композит алюминий (Al) - магний (Mg), обладающий большим потенциалом будущего применения. Исследование перемешивания атомов в границе между слоями Al и Mg проводится методом молекулярной динамики (МД). В качестве деформационной обработки выбран следующий способ деформации: одноосное сжатие, перпендикулярное границе перемешивания атомов, в комбинации с деформацией сдвига в плоскости границы [3]. Преимущество метода МД заключается в моделировании эволюции систем по времени. Стоит отметить, что метод МД позволяет с большей точностью и вероятностью определить координаты атомов, энергию, температуру и другие параметры системы. Также проведено исследование механических свойств посредством одноосного растяжения. В работе проводится моделирование в программе LAMMPS с использованием специально разработанного для подобных структур потенциалом EAM [5], который хорошо согласуется с экспериментальными данными.

На рисунке 1 показана схема выбранной начальной структуры, которая представляет собой кубический образец размером $L_x = L_y = L_z \approx 100 \text{ \AA}$, содержащий 54 170 атомов с параметрами решетки $a_{Mg} = 3,203 \text{ \AA}$, $c_{Mg} = 5,2 \text{ \AA}$, $a_{Al} = 4,05 \text{ \AA}$.

Периодические граничные условия применяются во всех направлениях. Постоянство температуры (300 K) в системе обеспечивает термостат Носе-Хувера.

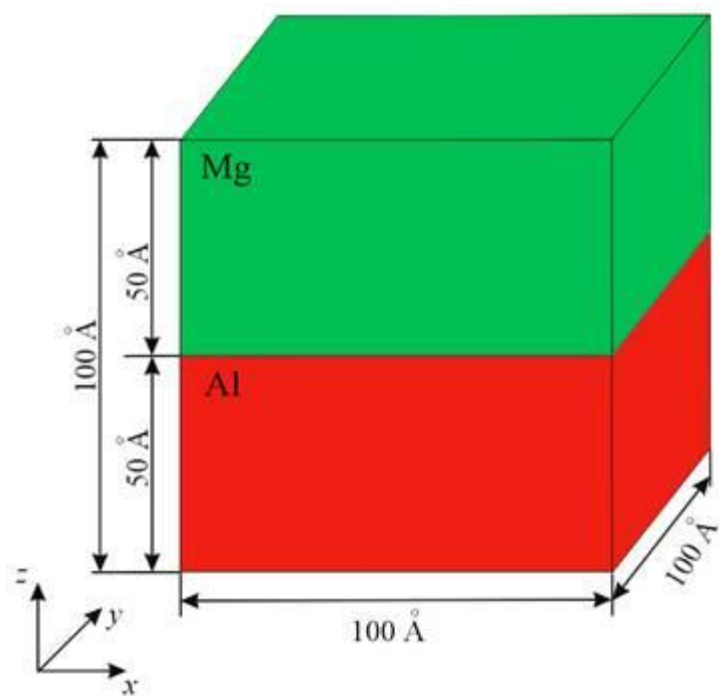


Рисунок. 1. Схема исходного образца

Результаты моделирования показывают, что выбранная деформационная обработка является эффективным способом получения композитной структуры, поскольку уже при малых степенях деформации (до $\varepsilon_{zz} = 0,4$) наблюдается активное перемешивание атомов, что видно на рисунке 2. Стоит отметить, что данной степени деформации недостаточно для получения прочной композитной структуры, поскольку испытания на растяжение показывают, что образование поры наблюдается на границе перемешивания атомов Al и Mg.

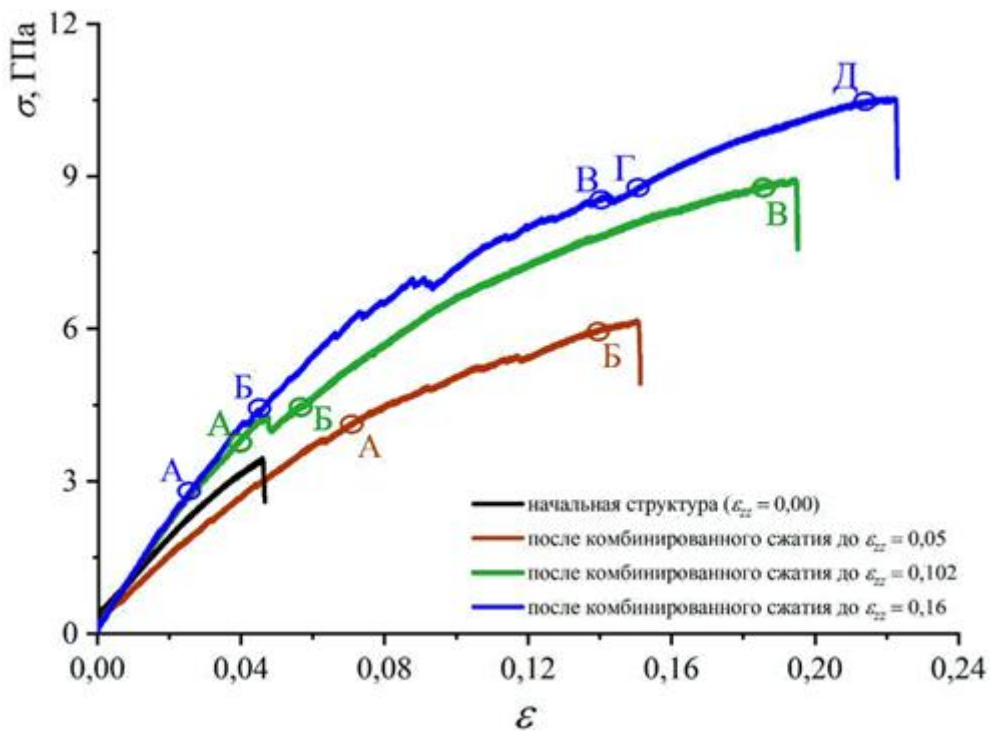


Рисунок. 2. Кривая напряжение-деформация в процессе одноосного растяжения перпендикулярного границе перемешивания атомов после комбинированного сжатия до разных степеней деформации: $\epsilon = 0,00$; $\epsilon = 0,05$; $\epsilon = 0,102$; $\epsilon = 0,16$

На рис. 2 представлены кривые напряжение-деформация в процессе одноосного растяжения перпендикулярного границе перемешивания атомов после комбинированного сжатия до разных степеней деформации: $\epsilon = 0,00$; $\epsilon = 0,05$; $\epsilon = 0,102$; $\epsilon = 0,16$. Также на рисунке хорошо видно, что структура после комбинированного сжатия со сдвигом в несколько раз прочнее, нежели начальная, так как образец выдерживает большую нагрузку. На рисунке 3 представлено изменение кристаллической решетки образца в процессе одноосного растяжения, перпендикулярного границе перемешивания атомов после одноосного сжатия, комбинированного с деформацией сдвига до степени деформации $\epsilon = 0,16$

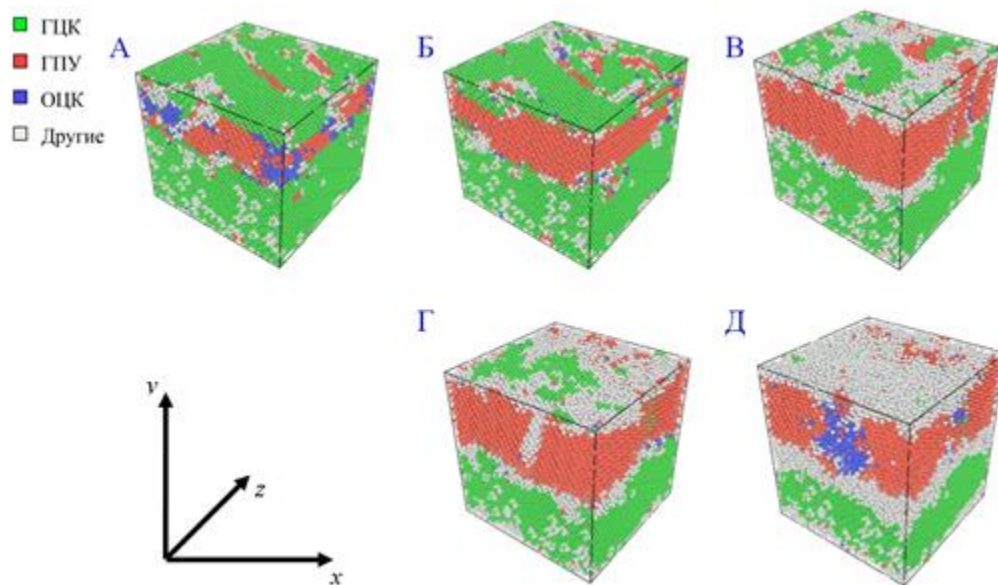


Рисунок. 3. Изменение структуры в процессе одноосного растяжения после комбинированного сжатия до степени деформации $\epsilon=0,16$

Результаты проведенных испытаний показывают, что процесс комбинированного сжатия до степеней деформации $\epsilon_{zz} = 0,4$ и $\epsilon_{zz} = 0,16$ не только способствует перемешиванию атомов на границе смешивания металлов Al и Mg, но и приводит к образованию пор в магниевой части образца (рис. 3). Это говорит о том, что при данных условиях обработки возникает структура, в которой граница перемешивания атомов прочнее, чем части чистого металла. Явление обусловлено изменением кристаллической решетки в зоне перемешивания атомов, что в свою очередь приводит к повышению прочности исследуемых образцов.