

Цель работы

Установить механизмы высокоскоростной пластической деформации α -Ti в условиях высокоэнергетических воздействий.

Актуальность

Титан и сплавы на его основе обладают высокой прочностью, биосовместимостью и коррозионной стойкостью. В сочетании с легким весом эти свойства делают их одним из основных материалов для аэрокосмических и медицинских применений. Высокая прочность этих материалов часто достигается формированием мелкозернистой структуры методами пластической деформации. К настоящему времени механизмы пластической деформации титана с hcr структурой (α -Ti) в условиях атмосферного давления и низких скоростей деформации хорошо изучены. Однако особенности механизмов деформации α -Ti при повышенных давлениях и температурах в условиях высокоэнергетических воздействий остаются не установленными.

Метод

В работе изложены результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования высокоскоростной деформации α -Ti при температуре $T = 700\text{K}$ и давлении 20GPa со скоростями 10^8 , $5 \cdot 10^7$ и 10^7 1/с, имитирующего условия высокоэнергетических воздействий. Модельный образец Ti с hcr решеткой задавался в виде прямоугольного параллелепипеда и содержал 53760 атомов в расчетной ячейке. Декартовы оси координат были ориентированы вдоль кристаллографических направлений hcr решетки таким образом, что ось x // $[10\text{-}10]$, ось y // $[-12\text{-}10]$ и ось z // $[0001]$. Использовались периодические граничные условия.

Результаты моделирования

Как видно из рисунка 1, наблюдаются два резких скачка в изменении σ_{xx} в области значений относительной деформации 0.035 и 0.08. При деформациях от 0 до 0.035 образец сохраняет бездефектную hcr структуру. После достижения деформации 0.035 наблюдается флукуационное зарождение дефектов, реализующих пластическую деформацию. На рисунке 2а проиллюстрирована атомная структура образца при деформации 0.04. Наблюдаются дефекты в виде пластин, расположенных в плоскостях, перпендикулярных плоскости рисунка.

Высокоскоростная пластическая деформация α -Ti начинается с флукуационного инициирования плоских дефектов лежащих в плоскости (1-100) и движущихся при деформации в направлении $[11\text{-}20]$, смещение атомов в торцах плоских дефектов происходит в плоскости (10-10). Данный дефект согласуется с известной призматической плоскостью скольжения (10-10) с вектором Бюргера дислокаций в направлении $[11\text{-}20]$, являющейся основной для Ti. Отмеченный механизм реализует пластическую деформацию α -Ti от значений 0.035 до 0.08 на рисунке 1.

При достижении области значений деформации 0.08 механизм высокоскоростной деформации меняется. Сформированные плоские дефекты служат источниками зарождения ω фазы, быстрое преобразование в которую реализует механизм пластической деформации α -Ti на следующей стадии.

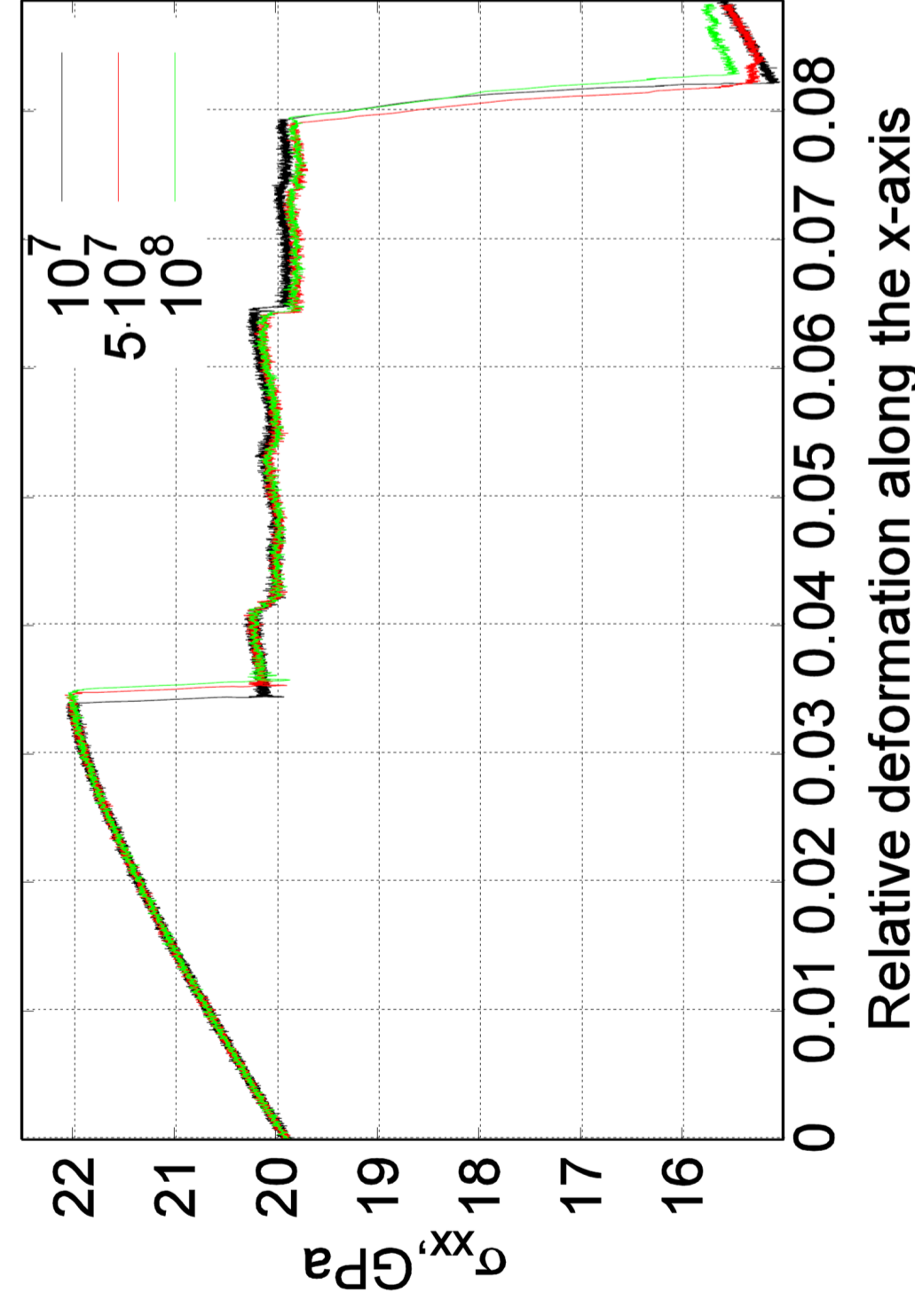


Рисунок 1. Величина компоненты тензора напряжений σ_{xx} зависимости от относительного уменьшения размера модельного образца Ti вдоль оси x в процессе высокоскоростной деформации при давлении 20GPa и температуре 700K для скоростей деформации 10^7 , $5 \cdot 10^7$ и 10^8 .

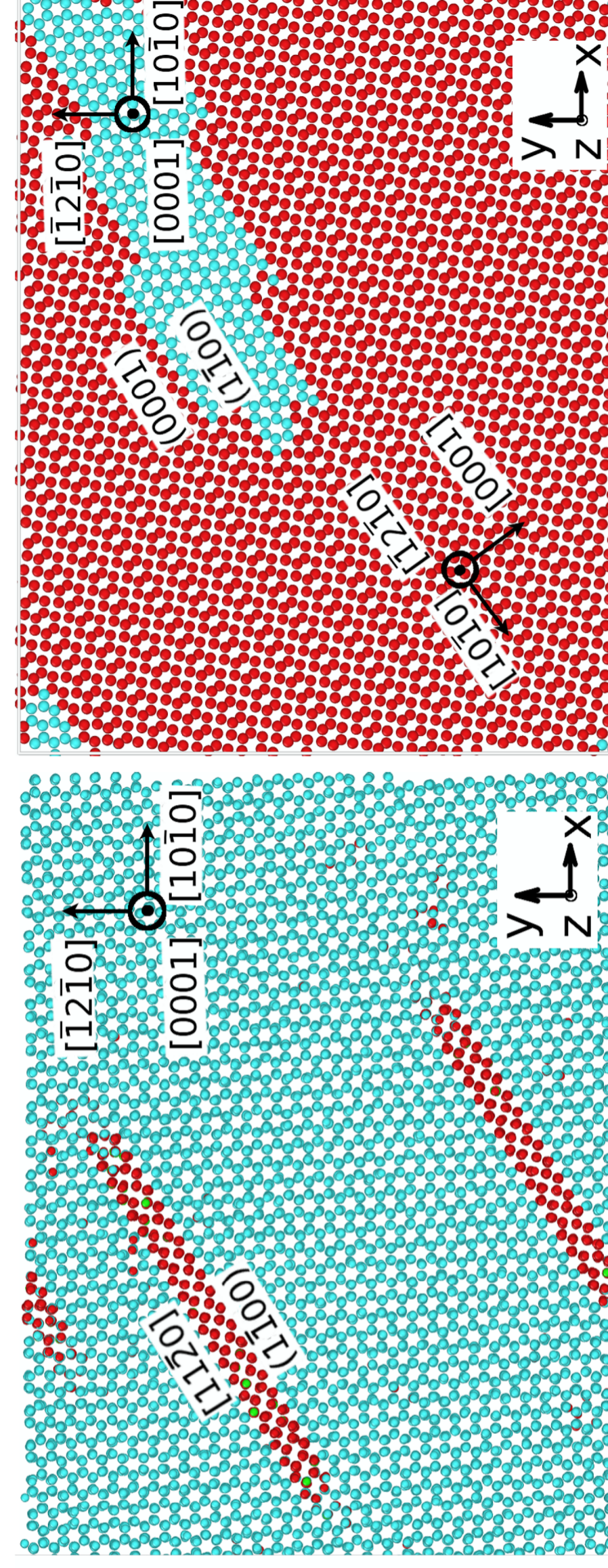


Рисунок 2. (a) - три соседних атомных слоя в плоскостях (0001) модельного образца hcr Ti при относительном уменьшении размера образца на 0.04 вдоль оси x . Синим цветом выделены атомы с локальным окружением hcr . Красным цветом выделены атомы с нарушением hcr упаковки, располагающиеся в плоскостях (1-100). (b) - три соседних атомных слоя в плоскостях, перпендикулярных оси z , модельного образца Ti после завершения моделирования пластической деформации. Синим и красным цветами выделены атомы с локальным окружением hcr и C32 , соответственно. Показаны кристаллографические направления в C32 решетке (ω фаза). Отмечены плоскости $\text{hcr}(1\text{-}100)$ и $\text{C32}(0001)$ на межфазной границе α/ω .

Заключение

Моделирование показало последовательную реализацию двух механизмов. Пластическая деформация титана начинается по известному механизму призматических плоскостей скольжения типа (10-10). Затем, деформация продолжается благодаря зарождению и росту ω фазы титана.

Процесс высокоскоростной деформации заканчивается преобразованием большей части образца в ω фазу, в которой остаются включения α фазы. Этот результат указывает на возможный метод получения мелкозернистого α -Ti посредством воздействия импульсами лазерного облучения или другими высокоэнергетическими воздействиями через временный переход α -Ti в ω фазу. При таком воздействии можно ожидать, что остающиеся дисперсные включения α фазы будут служить зародышами роста кристаллитов α -Ti и формировать мелкозернистую структуру в процессе возвращения к нормальным условиям давления и температуры.