МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУСТВЕННЫХ НЕЙРОСЕТЕЙ

Балякин И.А. [1,3], **Ремпель А.А.** [1,2]

[1]Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия
[2]НОЦ НАНОТЕХ, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
[3] Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
E–mail: i.a.balyakin@gmail.com

Высокоэнтропийный сплав (ВЭС) обладает повышенной конфигурационной энтропией смешения, как правило, за счет формирования однофазного неупорядоченного твердого раствора большого числа компонентов [1]. Поскольку для многокомпонентных систем число возможных составов, так же, как и число возможных одновременно сосуществующих фаз велико, то уже на ранних этапах исследования ВЭС разрабатывались различные критерии формирования однофазных систем. Первые разработанные критерии были основаны на парных энтальпиях смешения и разнице размеров атомов, входящих в сплав [2]. Позднее, был предложен метод, основанный на анализе парциальных парных корреляционных функций (ППКФ), рассчитываемых методом первопринципной молекулярной динамики (МД) [3]. Недостатком первопринципной МД, используемой для получения ППКФ, является низкая производительность в сравнении с классической МД. В то же время, классическая МД на данный момент неприменима для многокомпонентных расплавов, поскольку необходимые потенциалы взаимодействия для них не разработаны. Тем не менее, использование в классической МД «математических» потенциалов, получаемых на основе многомерных искусственных нейросетей, может позволить объединить точность первопринципных методов и производительность классической МД [4].

В настоящей работе, в качестве тестовой системы выбрана пятикомпонентная тугоплавкая система VZrNbHfTa, для которой показано, что динамические характеристики (автокорреляционные функции скоростей, зависимость среднеквадратического смещения от времени для разных сортов атомов) и структурные характеристики (ППКФ) рассчитанные методом классической МД с использованием «математических» потенциалов, близки к величинам, полученным с помощью первопринципной МД.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием ИМЕТ УрО РАН, вычисления производились на кластере «Уран» ИММ УрО РАН.

Список литературы:

[1] Otto F. et al, Acta Mater., vol. 61, no. 7, pp. 2628–2638, April 2013.
[2] Zhang Y. et al, Adv. Eng. Mater., vol. 10, no. 6, pp. 534–538, June 2008.
[3] Gao M., Alman D., Entropy, vol. 15, no. 10, pp. 4504–4519, October 2013.
[4] Behler J., Parinello M., Phys. Rev. Lett., vol. 98, no. 14, April 2007.

ФОРМИРОВАНИЕ МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В СПЛАВЕ ВТ5–1 ПРИ ГОРЯЧЕЙ ДЕФОРМАЦИИ СЖАТИЕМ В ОДНОФАЗНОЙ α – ОБЛАСТИ

Бердин Н.В. [1], **Бецофен С.Я.**[2]*, **Смыслов А.М.**[1], **Грушин И.А.** [2]

[1]Уфимский государственный авиационно–технический университет, Уфа, Россия
[2]Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия
*E–mail: s.betsofen@gmail.com

Методами EBSD, оптической и просвечивающей электронной микроскопии исследовали влияние вида напряженного состояния на характеристики динамической

рекристаллизации и деформационное поведение при испытании сжатием при температурах 800 и 900ºС и скоростях деформации 4,0 x 10^{-5} 6,0 x 10^{-3} c^{-1} α–титанового сплава ВТ5–1.

Установлены закономерности влияния температуры и скорости деформации, а также гидростатической компоненты напряженного состояния на тонкую структуру, текстуру, размер зерна и распределение этих зерен по разориентировкам.

Показано, что при температуре 900ºС усиливается зависимость размера зерна и интенсивности динамической рекристаллизации от скорости деформации. Повышение уровня гидростатического компонента тензора напряжений приводит к уменьшению среднего размера зерна и одновременно снижению объемной доли рекристаллизованных зерен.

Результаты получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России ГЗ 11.1989.2017/ПЧ

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ МЕЛКОЗЕРНИСТЫХ МЕДНЫХ СПЛАВОВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ РКУП

Бобров А.А.[1], **Чувильдеев В.Н.**[1], **Грязнов М.Ю.**[1], **Чегуров М.К.**[1], **Шадрина Я.С.**[1], **Нохрин А.В.**[1], **Копылов В.И.**[1,2]

[1] Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия
[2] Физико–технический институт НАН Беларуси, Минск, Беларусь
E–mail: nokhrin@nifti.unn.ru

В качестве объектов исследования выступала высокочистая медь М00к, микролегированные (0.1, 0.25, 0.50 вес.%Ag) медные сплавы и хромовые бронзы Cu–0.4Cr, полученные методом индукционного литья в вакууме. Мелкозернистая (МЗ) структура сформирована методом равноканального углового прессования.

Показано, что кривые деформации МЗ меди при комнатной температуре имеют характерный вид для сильнодеформированного металла; максимальное удлинение (δ) до разрушения мало и не превышает 32–34%. Увеличение температуры испытания до 300 ºС привело к снижению δ до 15%; напряжение течения уменьшилось от 390 МПа до 255 МПа, что обусловлено интенсивным ростом зерна. Повышение температуры испытания до 400 ºС приводит к повышению пластичности МЗ меди до 85% и снижению напряжения течения до 125 МПа. Кривая растяжения имеет вид, характерный для высокопластичного материала. Изломы образцов МЗ меди имеют вязкий характер.

Установлено, что положительное влияние легирующих элементов (ЛЭ) наблюдается только в случае малых добавок легирующих элементов (не более 0.1 вес.%) – в этом случае удается обеспечить в 1.5–2 раза большую пластичность по сравнению с МЗ медью. Кривые деформационного упрочнения МЗ сплава Cu–0.1Ag обнаруживают стадию пластического течения уже при температуре 300 ºС, пластичность МЗ сплава при этом достигает 135–140%, что превышает пластичность МЗ меди при этой температуре. При температуре испытания 400 ºС пластичность МЗ сплава Cu–0.1Ag составляет 140–150%. Изломы образцов МЗ сплава Cu–0.1Ag после испытаний на растяжение имеют характерный вязкий характер. Размер зерна в зоне разрушения после испытания при температуре 350–400 ºС составляет d=3–5 мкм. Зерна вытянутой формы, но коэффициент удлинения зерен относительно мал. Показано, что повышение концентрации серебра до 0.25–0.5% приводит к снижению интенсивности деформационно–стимулированного роста зерен (d=1–2.5 мкм после испытания при температуре 350–400 ºС), но приводит к снижению пластичности – для МЗ сплава Cu–0.25Ag при T=400 ºС – δ = 37–40%, а для МЗ сплава Cu–0.5Ag – δ = 15–20%.