

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2019 г. по 30.06.2020 г.

по проекту **«Многоуровневое моделирование влияния фазовой структуры на механические свойства ультрамелкозернистых сплавов Ti-Nb и Zr-Nb при квазистатических и динамических воздействиях»**,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 18-71-00117

Руководитель: канд. физ.-мат. наук Скрипняк Наталья Владимировна

1) В результате проведенных вычислительных экспериментов получены зависимости напряжения течения сплавов TiNb, Zr-Nb от нормированной скорости деформации и температуры, демонстрирующие закономерности термического разупрочнения и скоростной чувствительности напряжения течения сплавов с учетом параметров фазовой структуры и распределения зерен по размерам.

2) Получены данные о влиянии концентрации фаз и распределения зерен по размерам на закономерности термического разупрочнения ОЦК сплавов Ti-Nb, Zr-Nb при повышенных температурах (выше температуры эвтектоидного перехода из альфа в бета фазы). Эффект термического разупрочнения проявляется в снижении предела текучести и немонотонном изменении напряжения течения с ростом степени пластической деформации. Влияние размеров зерна на эффект термического разупрочнения сплавов Ti-Nb и Zr-Nb неявно связано с изменениями концентрации дисперсных упрочняющих частиц бета Nb в области границ зерен при повышенных температурах.

Полученные при численном моделировании диаграммы напряжение - деформация для сплавов Ti-Nb и Zr-Nb с объемно-центрированной кубической решеткой при заданных скоростях деформации и начальных температурах свидетельствуют о том, что закономерности деформационного упрочнения исследованных бинарных сплавов обусловлены дислокационными механизмами и двойникованием. В этой связи, при повышенных температурах и скоростях деформации, деформационное упрочнение сплавов Ti-Nb и Zr-Nb с объемно-центрированной кубической решеткой определяется формированием дислокационных субструктур, ростом объемной концентрации двойников в зернах, а также взаимодействием дефектов с границами зерен.

3) При проведении вычислительного эксперимента получены данные об изменениях эффективного напряжения течения и макроскопической пластической деформации сплавов Ti-Nb и Zr-Nb при повышенных температурах, связанных с изменениями параметров распределения зерен по размерам в результате динамической рекристаллизации. Протекание динамической рекристаллизации в ОЦК сплавах Ti-Nb и Zr-Nb при повышенных температурах сопровождается ростом объема зерен с микронными размерами. Анализ этих данных свидетельствует о

влиянии параметров распределения размеров зерен на закономерности термического разупрочнения сплавов в широком диапазоне скоростей деформации.

4) Получены данные о закономерностях термического разупрочнения при растяжении сплавов со скоростями 1, 10, 100 и 1000 1/с при температурах 873 К и 1273 К.

5) В результате вычислительных экспериментов получены расчетные диаграммы напряжение-деформация для сплавов Ti-Nb с объемно-центрированной кубической решеткой в диапазоне скоростей деформации 1, 10, 100 и 1000 1/с при температурах 873 К и 1273 К, показывающие влияние параметров распределения зерен по размерам на параметр скоростной чувствительности напряжения течения сплавов.

6) В результате численного моделирования получены диаграммы напряжение-деформация для сплавов Zr-Nb с объемно-центрированной кубической решеткой, упрочненных дисперсными частицами Nb и частицами гидридов Zr (ZrH_{0.5}, ZrH, ZrH_{1.5-1.7}, ZrH₂).

7) Численное дифференцирование аппроксимирующих зависимостей напряжения течения по величине эквивалентной скорости деформации при фиксированных степенях пластической деформации позволило определить значения параметра скоростной чувствительности напряжения течения для модельных объемов сплавов. Показано, что параметр скоростной чувствительности напряжения течения бинарных сплавов Ti-Nb и Zr-Nb нелинейно зависит от концентрации ГПУ и ОЦК фаз.

8) Разработана методика многоуровневого моделирования для исследования и прогнозирования влияния параметров фазовой структуры и распределения зерен по размерам на физико-механические свойства гетерогенных ультрамелкозернистых ОЦК и ГПУ сплавов.

В разработанной методике многоуровневого моделирования использована модифицированная физико-математическая модель упругопластического поведения ультрамелкозернистых сплавов, зарождения и роста повреждений структуры. Методика использована для исследования влияния параметров фазовой структуры на физико-механические свойства гетерогенных ультрамелкозернистых ОЦК и ГПУ сплавов.

9) Разработана методика определения численных значений коэффициентов определяющих уравнений и уравнений, описывающих зарождение и рост повреждений структуры сплавов при высокоскоростной деформации.

10) Разработан алгоритм применения физико-математической модели при численном решении задач о нагружении элементов конструкций с учетом параметра трехосности напряженного состояния. В физико-математической модели упругопластического поведения ультрамелкозернистых сплавов учтена возможность изменения фазового состава и зеренной структуры сплавов при изменении концентрации Nb. В соответствии с фазовыми диаграммами бинарных сплавов,

кристаллическая структура фаз сплавов Ti-Nb и Zr-Nb в диапазоне температур до 1273 К зависит от концентрации Nb. Учет в модели изменения параметров определяющих уравнений в зависимости от фазового состояния сплавов позволил адекватно описать механическое поведение сплавов Ti-Nb и Zr-Nb в условиях квазистатического и динамического нагружения в широком диапазоне температур существования конденсированных фаз.

11) Методика многоуровневого моделирования физико-механических свойств ОЦК и ГПУ сплавов влияния параметров с учетом распределения зерен по размерам использует:

- модифицированную физико-математическую модель для описания пластической деформации, зарождения и роста повреждений структуры;
- методику определения численных значений коэффициентов модели для бинарных сплавов Ti-Nb и Zr-Nb;
- алгоритм реализации модели упругопластического деформирования сплавов с заданными параметрами зеренной и фазовой структуры, модели зарождения и роста повреждений при численном решении квазистатических и динамических задач.

Учет распределения зерен по размерам и вероятных механизмов пластической деформации позволяет с применением многоуровневого численного моделирования получать прогнозы влияния зеренной структуры на физико-механические свойства ультрамелкозернистых ОЦК и ГПУ сплавов Ti-Nb и Zr-Nb.

12) С использованием результатов компьютерного моделирования получены прогнозы неустойчивости пластического течения для сплавов.

13) Разработана и зарегистрирована программа для ЭВМ. Разработанная методика многоуровневого моделирования для прогнозирования влияния параметров фазовой и зеренной структуры на физико-механические свойства ультрамелкозернистых ОЦК и ГПУ сплавов Ti-Nb, Zr-Nb реализована в программе для ЭВМ. Валидация разработанной программы и компьютерного кода выполнена с помощью тестового моделирования условий испытаний конкретных сплавов с известными параметрами структуры и фазового состава.