

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2018 г. по 30.06.2019 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 выполнения проекта была разработана многоуровневая модель упругопластического поведения ОЦК и ГПУ сплавов, связывающая макроскопические прочностные и деформационные свойства с общими закономерностями эволюции дислокационной и двойниковой структуры на уровне зерен, а также учитывающих распределение зерен по размерам, параметры интерфейсных и зеренных границ на уровне представительных объемов материала. Модель позволяет описывать упругопластическое поведение ОЦК и ГПУ сплавов Ti-Nb и Zr-Nb при растяжении в широких диапазонах скоростей деформации и температуры. Модель связывает макроскопические прочностные и деформационные свойства (пределы текучести, закономерности деформационного упрочнения) с общими закономерностями эволюции дислокационной и двойниковой структуры на уровне зерен. В модели учтена возможность развития пластических деформаций вследствие роста концентрации двойников. В разработанной многоуровневой модели на уровне представительных объемов сплавов учитывается распределение зерен по размерам, параметры интерфейсных и зеренных границ.

2) Разработана методика калибровки уравнений модели, описывающих процессы в структуре сплавов на разных масштабных уровнях, на основе имеющихся экспериментальных данных о дефектной структуре и развитии пластической деформации сплавов на основе Ti-Nb, Zr-Nb в поликристаллическом и ультрамелкозернистом состояниях. Для определения соответствующих коэффициентов в логнормальном законе распределения размеров зерен были использованы экспериментальные гистограммы распределения зерен по размерам, полученные для образцов ультрамелкозернистых сплавов Zr-1%Nb и Ti-45%Nb, после интенсивной пластической деформации. Для генерации их модельных объемов были использованы данные о зеренной структуре и фазовом составе сплавов. Данные о структуре и диаграммы упругопластического деформирования сплавов Zr-1%Nb и Ti-45%Nb были использованы для валидации уравнений модели. Тестовые расчеты, выполненные для скорости деформации растяжения 11/с и температуре 295 К, показали хорошее качественное и количественное согласие расчетных значений модулей Юнга, пределов текучести и параметров деформационного упрочнения сплавов Zr-1%Nb и Ti-45%Nb с экспериментальными данными.

На основе имеющихся экспериментальных данных о закономерностях упругопластической деформации сплавов Ti-Nb, Zr-Nb с известными

характеристиками зеренных структур, их фазового и химического состава были определены численные значения коэффициентов уравнений модели. Для определения коэффициентов кинетических соотношений для двойникования в сплавах Ti-25%Nb были использованы данные микроструктурных измерений толщины двойников.

Для определения численных значений коэффициентов в эволюционном уравнении для плотности дислокаций были использованы диаграммы деформирования сплава Ti-13Nb- при температурах 293 К, 573 К и 873 К. С использованием диаграмм деформирования при растяжении и экспериментальных данных о микроструктуре сплава были определены коэффициенты уравнений, описывающих скольжение дислокаций.

Разработанная модель с полученными численными значениями коэффициентов позволяет описать деформационное упрочнение при растяжении сплавов Ti-Nb в диапазоне степеней пластической деформации от 0 до 40 %. Степень отклонения расчетной скорости деформационного упрочнения с экспериментальными значениями не превышает 10%.

3) В результате проведенного вычислительного эксперимента были получены данные о влиянии параметров зеренной структуры сплавов Ti-Nb, Zr-Nb на механические свойства и закономерности упругопластического поведения при квазистатическом растяжении.

В результате проведенных вычислительных экспериментов были получены значения величины эффективного модуля Юнга для сплавов Ti-Nb и Zr-Nb в зависимости от концентрации Nb в диапазоне от 1 до 40% при фиксированных температурах в диапазоне от 295 К до 1200 К.

Изменение концентрации Nb в сплавах Ti-Nb или Zr-Nb приводит к изменению в них содержания альфа- и бета-фаз, которые имеют разные модули упругости и значения предела текучести. Известные феноменологические равновесные фазовые диаграммы сплавов Ti-Nb или Zr-Nb позволили определить объемную концентрацию альфа- и бета-фаз для различных значений массовой концентрации Nb.

В результате выполненных вычислительных экспериментов были получены зависимости модуля Юнга от концентрации бета фазы в сплавах Ti-Nb, Zr-Nb. Показано, что увеличение концентрации бета фазы в двухфазных сплавах Ti-Nb сопровождается снижением эффективного значения модуля Юнга.

При моделировании распространения импульсов напряжений в модельных объемах сплавов были оценены зависимости модуля Юнга, модуля объемного сжатия и модуля сдвига в сплавах Ti-Nb и Zr-Nb с различными зеренными структурами (поликристаллической, ультрамелкозернистой, с бимодальным распределением зерен по размерам). Результаты моделирования показали, что распределение зерен по размерам и средние величины размеров зерен слабо влияет на эффективные значения модулей упругости.

В результате моделирования растяжения с постоянной скоростью деформации модельных объемов сплавов Ti-13%Nb, Ti-45%Nb и Zr-1%Nb с различными

зеренными структурами получены данные о влиянии параметров зеренной структуры на их деформационное упрочнение.

На основе результатов компьютерного моделирования были получены закономерности упругопластического деформирования поликристаллических сплавов с одномодальным распределением зерен по размерам, ультрамелкозернистых сплавов с одномодальным и бимодальным распределением зерен по размерам. Сплавы Ti-Nb и Zr-Nb с ультрамелкозернистой структурой демонстрируют более высокие значения пределов текучести, но существенно меньшие значения деформационного упрочнения по сравнению со сплавами в крупнокристаллическом состоянии и со сплавами с бимодальным распределением зерен по размерам.

В результате компьютерного моделирования растяжения модельных объемов сплавов Ti-Nb и Zr-Nb со скоростью деформации 0.01 1/с при температуре 295 К были получены диаграммы напряжение-деформация с фиксированными концентрациями Nb: 1%, 13% и 45%. Полученные результаты позволили оценить влияние концентрации Nb на деформационное упрочнение сплавов при растяжении. Показано, что с ростом концентрации Nb от 1% до 45% напряжение течения сплавов Ti-Nb возрастает в 1.5 раза.