

**SIMULATION OF DEFORMATION-INDUCED DISSOLUTION
OF ZR SEGREGATIONS IN AL LATTICE**O. S. Petrova ^{1a}, A. Y. Morkina ^{1b}, R. I. Babicheva ^{2c}, E. A. Korznikova ^{1d}¹ Ufa State Aviation Technical University (UGATU)² School of Mechanical and Aerospace Engineering, Nanyang Technological University^a petrova.olesya02@mail.ru, ^b alinamorkina@yandex.ru, ^c ri.babicheva@mail.ru, ^d elena.a.korznikova@gmail.com

Submitted 2022, October 30

Abstract. Aluminum (Al) and zirconium (Zr) alloys have become popular due to their excellent thermal stability and good electrical conductivity, but their main disadvantage is their rather low hardness (<75 Hv) even after severe plastic deformation. The paper presents the results of numerical simulation by the method of molecular dynamics of the deformation-induced dissolution of Zr in the Al lattice. Cases of longitudinal and transverse arrangement of segregations were considered. It has been established that in the longitudinal position, the dissolution of the Zr segregation in the Al structure occurs more intensively than in the transverse position. It is shown that the lower the strain rate, the greater the dissolution of Zr in the Al lattice, and the presence of a vacancy in the lattice contributes to a greater dissolution of segregation.

Keywords: molecular dynamics; Al-Zr; shear deformation; segregation; vacancies.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОГО РАСТВОРЕНИЯ
СЕГРЕГАЦИЙ ZR В РЕШЕТКЕ AL**O. S. Петрова ^{1a}, А. Ю. Моркина ^{1b}, Р. И. Бабичева ^{2c}, Е. А. Корзникова ^{1d}¹ ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет» (УГАТУ)² Школа машиностроения и аэрокосмической инженерии, Наньянский технологический университет^a petrova.olesya02@mail.ru, ^b alinamorkina@yandex.ru, ^c ri.babicheva@mail.ru, ^d elena.a.korznikova@gmail.com

Поступила в редакцию 30.10.2022

Аннотация. Сплавы алюминия (Al) и циркония (Zr) стали популярны благодаря своим характеристикам: превосходной термостойкости и хорошей электрической проводимости, но их основным недостатком является довольно низкая твердость (<75 Hv) даже после сильной пластической деформации. В работе представлены результаты численного моделирования методом молекулярной динамики деформационно-индуцированного растворения Zr в решетке Al. Были рассмотрены случаи продольного и поперечного расположения сегрегаций. Установлено, что в продольном положении растворение сегрегации Zr в структуре Al происходит интенсивнее, чем в поперечном. Показано, что чем ниже скорость деформирования, тем больше растворения Zr в решетке Al, и присутствие вакансии в решетке способствуют большему растворению сегрегации.

Ключевые слова: молекулярная динамика; сплавы; кристаллическая решетка; сдвиговая деформация; сегрегация; дефекты; экстремальные воздействия; неравновесные состояния.

ВВЕДЕНИЕ

Разработка высокопрочных алюминиевых сплавов является сложной и актуальной задачей для различных областей применения, особенно для автомобильной и авиационной промышленности. Легкие и высокопрочные сплавы Al рассматриваются в качестве потенциальных альтернатив традиционно производимым литым сплавам на основе Ti и Fe для снижения веса различных конструктивных компонентов, таких как поршни двигателей внутреннего сгорания, коллекторы, головки цилиндров, теплообменники, электрические проводники и т.д. Однако низкая прочность и низкая тепловая стабильность чистого Al ограничивает расширение его использования в конструкционных приложениях. В данный момент идет активная работа по разработке и рациональному подходу к получению новых прочных сплавов Al с высокой термостабильностью и надлежащей электропроводимости, для которых используют различные методы компьютерного моделирования, что значительно упрощает многие процессы.

Сплавы Al обусловлены стабильностью твердой фазы $L1_2$ при высоких гомологических температурах, а также медленной кинетикой диффузии и малой растворимостью Zr в Al. Среди различных добавок в сплавах алюминия, необходимо отметить цирконий, так как он является привлекательным своими характеристиками, поскольку больший атомный радиус металла (радиусы Гольдшмидта: 0,160 нм для Zr по сравнению с 0,143 нм для Al) и связующие свойства атомов Zr, а также их малая диффузионная способность в Al могут повысить их термическую стабильность [1], однако основным его недостатком является нерастворимость в Al в форме твердого раствора. Несмотря на такую несмешиваемость, небольшое количество Zr может остаться в решетке Al во время кристаллизации. Но эти остаточные атомы Zr могут образовывать когерентные и термодинамически метастабильные выделения Al_3Zr с кубической структурой $L1_2$ после длительного старения (до 400 ч) при высоких температурах (до 698 K) [2]. Осаждение метастабильных интерметаллидов может привести к смещению границ и подавлению роста зерен при воздействии высоких температур на материал, несмотря на небольшое несоответствие параметров решетки с Al.

Хорошо известно, что интенсивная пластическая деформация может вызвать значительное перемешивание, например, как в барабанно-шаровой мельнице. Для кручения под высоким давлением и холодной прокатки [3] были зарегистрированы аналогичные особенности.

Растворение частиц одной фазы в другой при сравнительно низких температурах (например, комнатной) ранее объяснялось процессами баллистического перемешивания, но при этом отмечалось, что детали этих процессов недостаточно ясны. На основе оценки подвижности различных дефектов авторы [4] предположили, что важную роль в процессе растворения может играть краудсионный механизм.

В работе [5] предпринята попытка проанализировать растворение частиц на микроскопическом уровне, с использованием методов атомистического моделирования.

Цирконий растворяется в алюминии, образуя твердый раствор, что снижает электрическую проводимость алюминия, но повышает прочность. При концентрации циркония 0,2 % и более в твердом растворе алюминия может образовываться интерметаллидное соединение $ZrAl_3$.

На основании работы [6] можно постулировать существенную роль границ зерен в процессах деформационно-индуцированного растворения дисперсных фаз в наноструктурных материалах.

В последние годы при изучении процесса низкотемпературного деформационно-индуцированного наноструктурирования (в том числе, при криогенных температурах до 77 K) экспериментально при сдвиге под давлением была показана возможность аномального растворения частиц интерметаллида Ni_3Al в матрице аустенитного сплава Fe-Ni-Al.

ДЕТАЛИ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Объектом исследования является кристаллит Al с сегрегацией Zr. Атомы Zr находятся в границах зерен трехмерной кубической гранцентрированной кристаллической решетки Al.

В качестве начальных условий задаются координаты и скорости атомов. В нулевой момент времени начальные положения атомов определены узлами кристаллической решетки, а скорости атомов полагаются равными нулю. Моделирование проведено при постоянной температуре $T = 300$ К (NVT ансамбль). Шаг по времени составил 1 фс. В границах зерен кристаллита из 30 тыс. атомов помещались частицы Zr в количестве 3 % атм.

Исследование проводилось с использованием пакета моделирования LAMMPS и программного обеспечения OVITO.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Была проведена симуляция эволюции атомной структуры Al, содержащей сегрегацию Zr, под действием сдвиговой деформации. На рис. 1 представлены распределение атомов Al и Zr (а) и анализ координации атомов (б). В первом случае атомы окрашены в соответствии с их координационным числом (красным цветом выделены атомы Al, синим – атомы Zr). Во втором случае атомы окрашены в соответствии с их локальной кристаллической структурой.

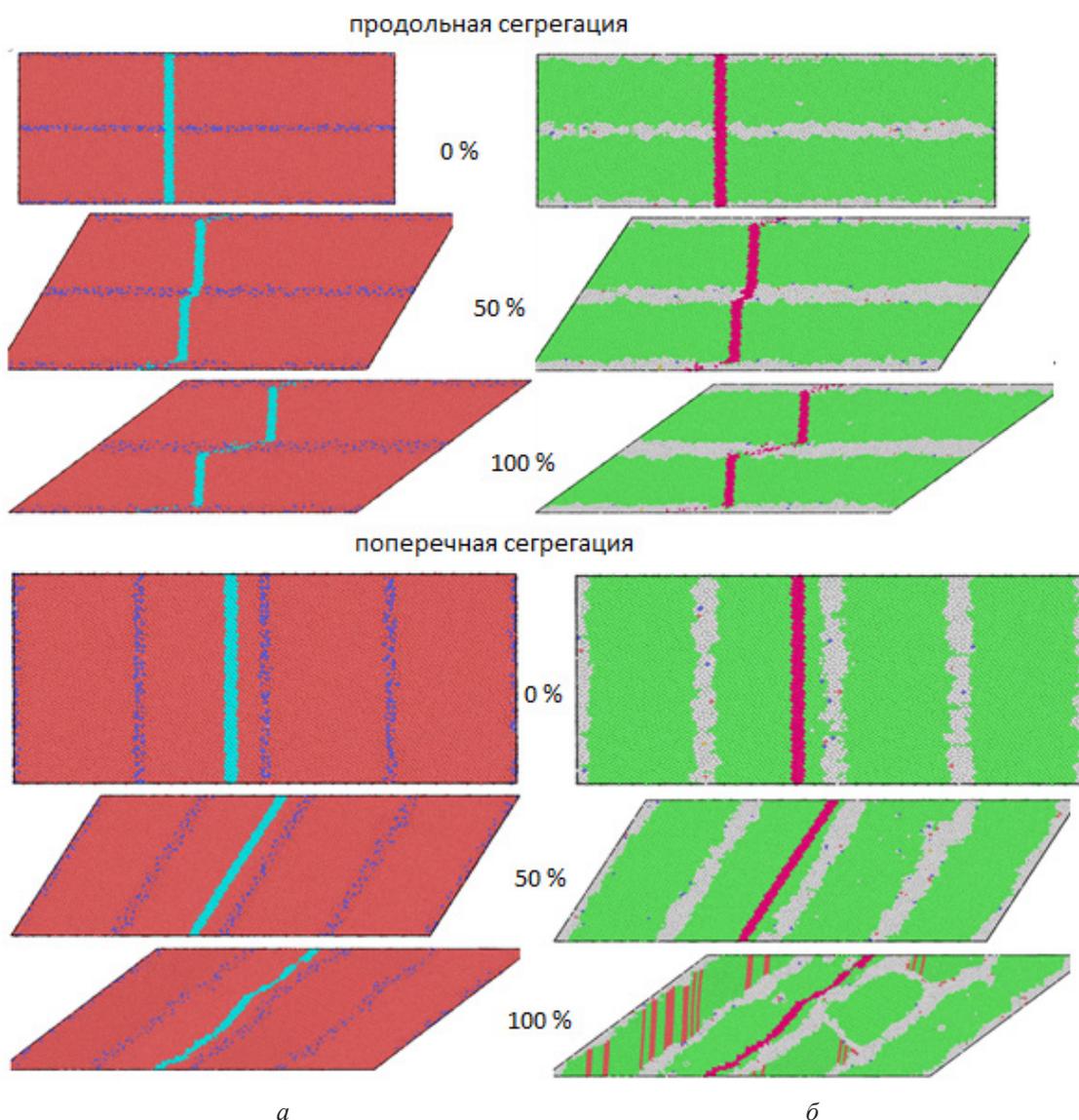


Рис. 1. Симуляции эволюции атомной структуры Al, содержащей сегрегацию Zr в продольном и поперечном положении, под действием 0 %, 50 % и 100 % сдвиговой деформации при 0 % вакансий и скорости деформации $\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^9$ сек⁻¹:

а – распределение атомов Al и Zr; *б* – анализ координации атомов (цветной вариант на сайте журнала)

На все приведенные симуляции нанесена сетка меченых атомов, с помощью которой можно отследить движение зерен. В случае продольного расположения сегрегации наблюдается проскальзывание. В случае поперечного расположения проскальзывание отсутствует, но появляются дефекты упаковки и двойники, и деформация протекает двойникованием. Видно, что при увеличении деформации происходит растворение частиц.

В продольном положении растворение сегрегации Zr в структуре Al происходит интенсивнее, чем в поперечном положении, о чем свидетельствуют кривые напряжение-деформация, представленные на рис. 3.

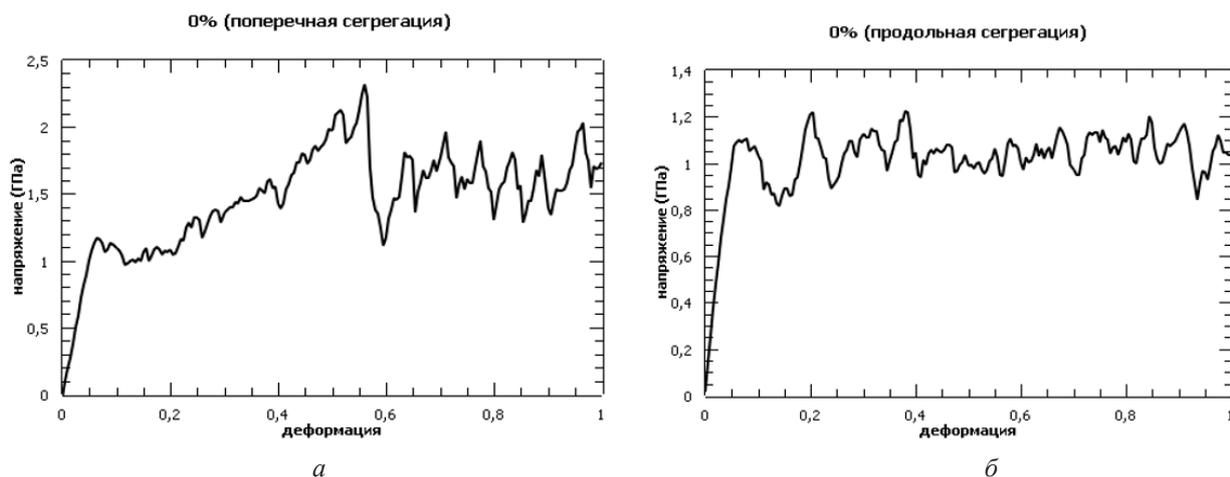


Рис. 2. Кривая напряжение-деформация для симуляции эволюции атомной структуры Al, содержащей сегрегацию Zr: а – в поперечном положении при содержании 0 % вакансий; б – в продольном положении при содержании 0 % вакансий

Из рис. 3 видно, что при добавлении в структуру Al вакансий интенсивность растворения Zr увеличивается, но это увеличение незначительно. Увеличение скорости растворения связано с тем, что скорость диффузии растет при повышении концентрации точечных дефектов.

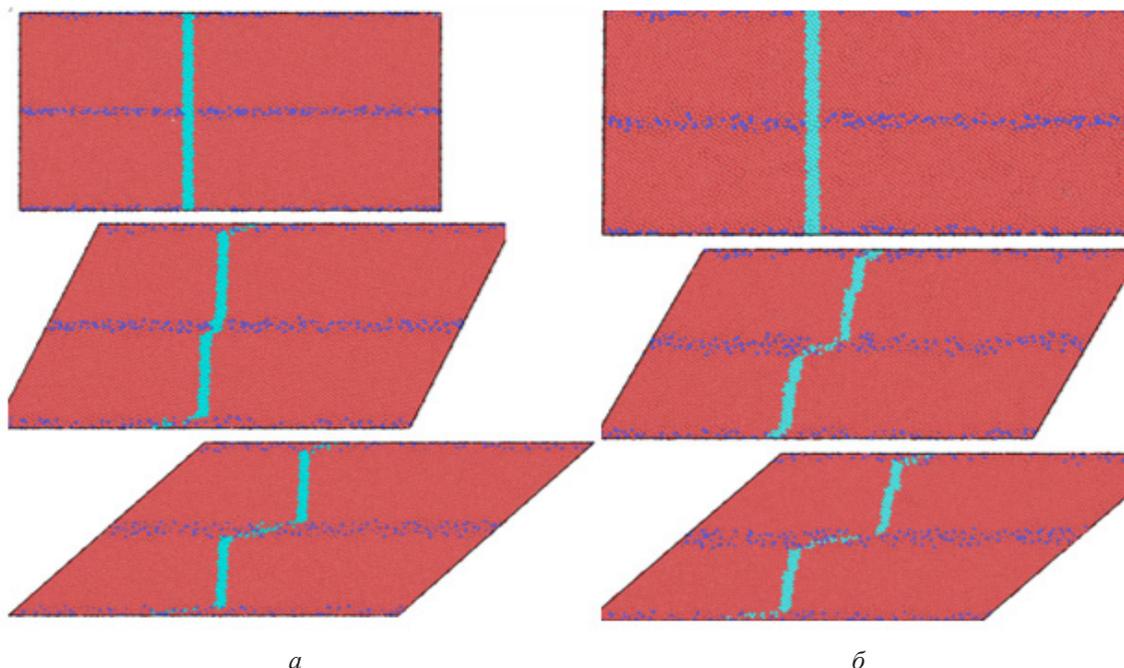


Рис. 3. Симуляции эволюции атомной структуры Al, содержащей сегрегацию Zr в продольном положении, под действием 0 %, 50 % и 100 % сдвиговой деформации:

а – содержание вакансий 0 %; б – содержание вакансий 10 % (цветной вариант на сайте журнала)

Для исследования влияния скорости деформации на скорость растворения частиц Zr в решетке Al, были рассмотрены случаи эволюции атомной структуры со скоростями деформации $\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1}$ и $\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^8 \text{ сек}^{-1}$. Полученные результаты представлены на рис. 4.

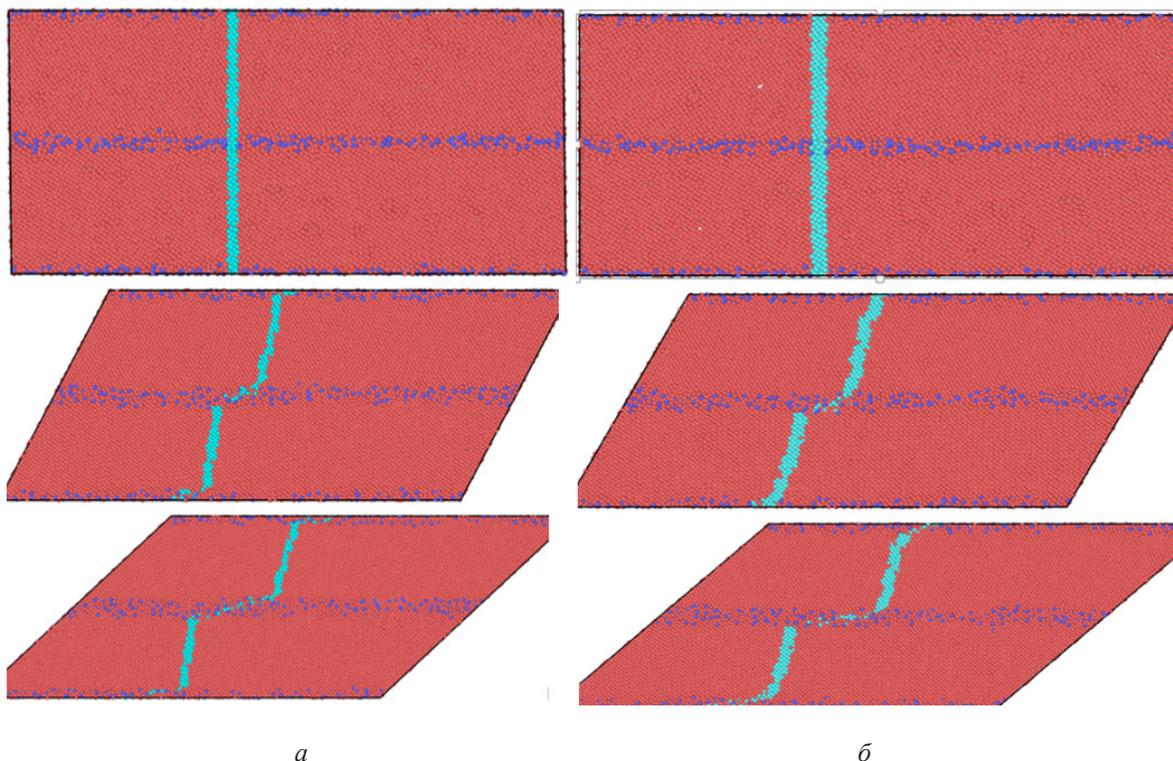


Рис. 4. Симуляции эволюции атомной структуры Al, содержащей сегрегацию Zr в продольном положении, под действием 0 %, 50 % и 100 % сдвиговой деформации:
a – скорость деформации $\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1}$; *б* – скорость деформации $\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^8 \text{ сек}^{-1}$
 (цветной вариант на сайте журнала)

Функция радиального распределения, представленная на рис. 5, показала, что, эффективность процесса механически индуцированного растворения обратно пропорциональна скорости сдвига. Приведенные на рис. 6 зависимости напряжения от деформации подтверждают это.

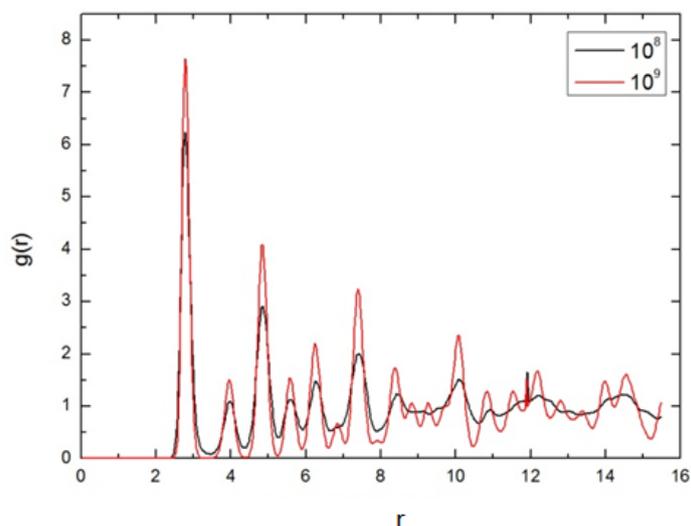


Рис. 5. График функции радиального распределения для двух скоростей деформации:
 $\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^8 \text{ сек}^{-1}$ и $\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1}$ (цветной вариант на сайте журнала)

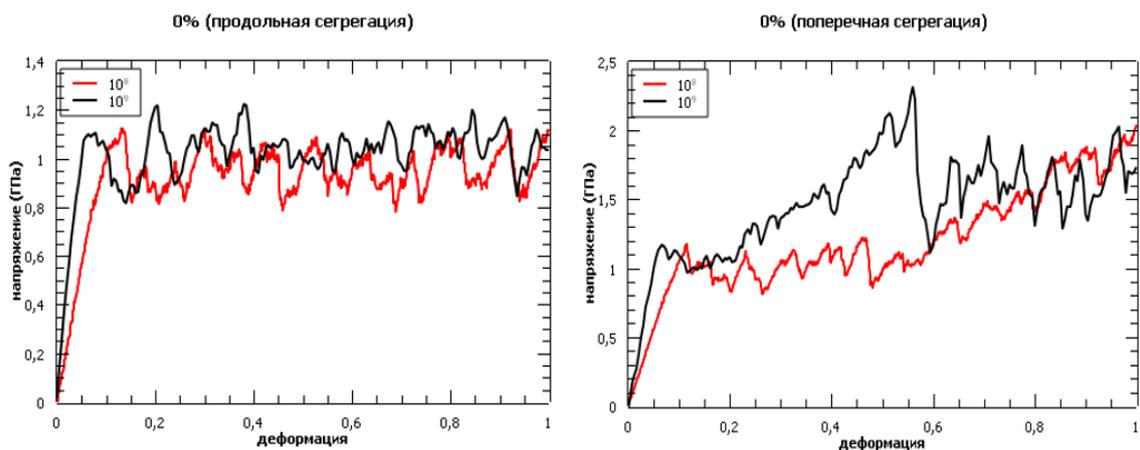


Рис. 6. Кривые напряжение-деформация для симуляций эволюции атомной структуры Al при разных скоростях деформации ($\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^8 \text{ сек}^{-1}$ и $\dot{\epsilon} = 1 \cdot 10^9 \text{ сек}^{-1}$), содержащей сегрегацию Zr:
а – в продольном положении; б – в поперечном положении (цветной вариант на сайте журнала)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были рассмотрены случаи продольного и поперечного расположения сегрегаций Zr в решетке Al. Установлено, что в продольном положении растворение сегрегации происходит интенсивнее, чем в поперечном. Были построены функции радиального распределения в различные моменты времени, отражающие степень растворения и зависимости напряжения и сдвига от степени деформации для различных случаев. Показано, что при меньшей скорости деформирования достигается большая степень растворения Zr в решетке Al. Присутствие вакансий в решетке способствуют большому растворению сегрегации Zr.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа А. Ю. Моркиной профинансирована в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки РФ ФГБОУ ВО «УГАТУ» (договор № 075-03-2022-318/1) в молодежной научной лаборатории «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» Работа Е. А. Корзниковой была поддержана Российским научным фондом, грант № 21-12-00275.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Thermal** stability of ultrafine-grained aluminum in the presence of Mg and Zr additions / H. Hasegawa, et al. // Materials Science and Engineering: A. 1999. Vol. 265. Pp.188-196.
2. **Nucleation** and precipitation strengthening in dilute Al-Ti and Al-Zr alloys / K. E. Knipling, et al. // Metallurgical and Materials Transactions A. 2007. Vol. 38. Pp. 2552-2563.
3. **Formation** and structure of Al-Zr metallic glasses studied by Monte Carlo simulations / J. H. Li, et al. // Journal of Applied Physics. 2011. Vol. 109. Article number 113538.
4. **Influence** of severe plastic deformation on microstructure, strength and electrical conductivity of aged Al-0.4 Zr (wt.%) alloy / T. S. Orlova, et al. // Reviews on Advanced Materials Science. 2018. Vol. 55. Pp. 92-101.
5. **Developing** age-hardenable Al-Zr alloy by ultra-severe plastic deformation: Significance of supersaturation, segregation and precipitation on hardening and electrical conductivity / A. Mohammadi, et al. // Acta Materialia. 2021. Article number 116503.
6. **Deformation-induced** dissolution of the intermetallics Ni3Ti and Ni3Al in austenitic steels at cryogenic temperatures / V. V. Sagaradze, et al. // Philosophical Magazine. 2016. Vol. 96. Pp. 1724-1742.

ОБ АВТОРАХ

ПЕТРОВА Олеся Сергеевна, студент каф. МиФМ.

МОРКИНА Алина Юрьевна, магистрант каф. МиФМ.

БАБИЧЕВА Рита Исмагиловна, канд. физ.-мат. наук, науч. сотр. (Школа машиностроения и аэрокосмической инженерии, Наньянский технологический университет).

КОРЗНИКОВА Елена Александровна, д-р физ.-мат. наук, зав. лабораторией «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях».

PETROVA, Olesya Sergeevna, student, Dept. of Materials Sci. and Physics of Metals.

MORKINA, Alina Yurievna, graduate student, Dept. of Materials Sci. and Physics of Metals.

BABICHEVA, Rita Ismagilovna, Cand. of Phys.-Math. Sci., Researcher (School of Mechanical and Aerospace Engineering, Nanyang Techno-logical University).

KORZNIKOVA, Elena Alexandrovna, Dr. of Phys.-Math. Sci., Head of the Laboratory "Metals and Alloys under Extreme Impacts".

Language: Russian.

Source: Vestnik UGATU (scientific journal of Ufa State Aviation Technical University), vol. 26, no. 4 (98), pp. 123-129, 2022. ISSN 2225-2789 (Online), ISSN 1992-6502 (Print).