

Сибирский государственный индустриальный университет, Россия
Международная высшая школа Цинхуа в Шэньчжэне, Китай
Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук, Россия
Алтайский государственный технический университет
имени И.И. Ползунова, Россия
Национальный исследовательский Томский
государственный университет, Россия
Научно-образовательный центр мирового уровня "Кузбасс", Россия
Университет науки и технологий Пекина, Китай
Хуачжунский университет науки и технологий, Китай
Университет Вэньчжоу, Китай
TGL Technology LTD, Великобритания

МАТЕРИАЛЫ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ

(МВП–2024)

20 марта 2024

Труды

XIII МЕЖДУНАРОДНОГО ОНЛАЙН СИМПОЗИУМА

УДК 669.017:539.2 (06)

ББК 22.9

М 39

Редакционная коллегия:

д-р физ.-мат. наук, профессор В.Е. Громов,
д-р техн. наук, доцент Д.В. Загуляев,
д-р техн. наук, доцент С.А. Невский,
научный сотрудник лаборатории ЭМиОИ А.Н. Гостевская,
преподаватель кафедры ТиЛ А.А. Серебрякова

М 39 Материалы во внешних полях : труды XII Международного онлайн-симпозиума / под ред. В.Е. Громова, Сибирский государственный индустриальный университет. – Новокузнецк : Издательский центр СибГИУ, 2024. – 105 с.

Сборник трудов конференции содержит научные доклады в области физики конденсированных сред, основанные на научных достижениях, сгруппированные по разделам: перспективные технологии поверхностной упрочняющей обработки, проблемы прочности, пластичности материалов при внешнем энергетическом воздействии, проблемы эксплуатации материалов в экстремальных условиях, исследования высокоэнтропийных сплавов, методы получения и обработки материалов. В докладах представлены результаты, полученные экспериментальными методами и теоретическим моделированием. Актуальность выбранных направлений обосновывается ежегодно проводимыми международными конференциями, специализированными изданиями, международными проектами, посвященными поднимаемым темам.

Сборник трудов предназначен для специалистов по прочности и пластичности материалов в условиях внешних энергетических воздействий и может быть использован научно-техническими работниками, аспирантами и студентами старших курсов.

УДК 669.017:539.2 (06)

ББК 22.9

© Сибирский государственный
индустриальный университет, 2024

Содержание

Секция 1 Передовые технологии упрочняющей поверхностной обработки	7
The impact of electron beam treatment on the structure and phase composition of TiB ₂ -Ag coating formed by electrical explosion spraying A.D. Filyakov, V.V. Pochetukha, D.A. Romanov, E.S. Vashchuk, V.E. Gromov	9
Создание структуры покрытий из быстрорежущей стали с использованием технологий плазменной наплавки, последующего отпуска и электронно-пучковой обработки Черепанова Г.И., Чапайкин А.С., Гусева Т.П., Громов В.Е.	11
Структура и свойства быстрорежущей стали после наплавки и отпуска Емельюшин А.Н., Миненко С.С., Громов В.Е., Чапайкин А.С., Семин А.П.	13
Особенности высокоэнергетического воздействия сварочного источника тепла на структуру и свойства теплостойких быстрорежущих сплавов Вострецов Г.Н., Малушин Н.Н., Башенко Л.П.	14
Твердость активного слоя рабочих валков холодной прокатки, сформированного многослойной плазменной наплавкой в среде азота.....	16
Малушин Н.Н., Громов В.Е., Романов Д.А., Башенко Л.П., Гостевская А.Н. ..	16
Секция 2. Проблемы прочности, пластичности материалов при внешних энергетических воздействиях	19
Расчет индуцированных токов при магнито-импульсном воздействии на кольцевой металлический цилиндр Сарычев В.Д., Сарычев Д.В., Володин Т.В., Грановский А.Ю.	20
Influence of reducing magnetic field induction on formation of lead surface during destruction A.A. Serebryakova, V.V. Shlyarov, D.V. Zaguliaev.....	22
Моделирование процесса формирования глобулярного перлита в сталях В.Д. Сарычев, А.Д. Филяков, В.А. Федотова, И.И. Чумачков, В.Е. Громов.....	23
Дислокационная субструктура титана, подвергнутого многоциклового усталости в магнитном поле Аксёнова К.В., Шляров В.В., Загуляев Д.В.....	25
Инициированный мощным пучком быстрых электронов синтез сложнооксидной керамики С. А. Гынгазов, И. П. Васильев, В. А. Болтуева, В. А. Власов	27
Влияние электронно-пучковой обработки на структуру и свойства плазменной наплавки быстрорежущей стали С.С. Миненко, Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов, А.Н. Гостевская, А.П. Семин, А.С. Чапайкин	28
Молекулярно-динамическое моделирование уменьшения пористости поверхностного слоя ОЦК кристалла, вызванной воздействием лазерных импульсов Гостевская А.Н., Маркижонов А.В., Кондратова О.А.....	30
Оценка механизмов упрочнения умз-титана, имплантированного ионами алюминия Никоненко А.В., Попова Н.А., Никоненко Е.Л.	31
Влияние формы монокристаллов на закономерности локализации сдвиговой деформации В.А. Печковский, Т.С. Куницына, Л.А. Теплякова.....	33
Влияние интенсивной пластической деформации на структурно-фазовое состояние технической чистой меди Попова Н.А., Никоненко Е.Л., Соловьёва Ю.В., Старенченко В.А.	35

Секция 1
Передовые технологии упрочняющей
поверхностной обработки

Секция 2.
Проблемы прочности, пластичности
материалов при внешних
энергетических воздействиях

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
УМЕНЬШЕНИЯ ПОРИСТОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ОЦК
КРИСТАЛЛА, ВЫЗВАННОЙ ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ
ИМПУЛЬСОВ**

Гостевская А.Н., Маркижонов А.В., Кондратова О.А.

*Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия
e-mail: gostevskaya_an@mail.ru*

Аннотация. Под воздействием лазерных импульсов возможны значительные изменения микроструктуры поверхностных слоев материалов, в частности под облученной поверхностью может наблюдаться протяженный дислокационный слой. В работе визуализирован процесс зарождения и последующего роста дислокаций, а также дислокационная реакция. Выполнены оценки изменения длины дислокаций при различных вариациях начальных условий и параметров моделирования. Возможно, результаты исследования найдут свое применение при описании процессов, протекающих при высокоэнергетическом воздействии на твердое тело.

Ключевые слова: модель, температура, дислокации, релаксация, погруженного атома.

На сегодняшний день лазерное излучение применяется во многих технологиях обработки и модификации поверхности материалов благодаря возможности локализации воздействия и высокой скорости нагрева участка мишени. Тем не менее, кроме очевидных преимуществ данная технология может приводить и к ряду нежелательных явлений в обрабатываемом материале, например, образованию высокой концентрации структурных дефектов. Несмотря на то, что данное явление общеизвестно, до сих пор остаются вопросы, относящиеся к механизмам образования, в частности, дислокаций. Традиционные представления об их генерации заключаются в образовании высокой концентрации точечных дефектов в поврежденном поверхностном слое, которые в дальнейшем кластеризуются, образуют вакансионные диски, трансформирующиеся путем схлопывания в дислокационные петли [1]. Кроме того, в качестве источника дислокационных петель рассматриваются увеличивающиеся в объеме области расплавленного материала, и при этом рост петель продолжается даже после кристаллизации расплава [2].

Целью данной работы является исследование изменений, происходящих на более поздней стадии релаксации.

Молекулярно-динамическая модель представляет собой прямоугольную расчетную ячейку, имитирующую монокристалл железа, и в которой оси координат соответствуют ортогональным кристаллографическим направлениям $[111]$, $[11\bar{0}]$ и $[112]$. Параметры потенциала межчастичного взаимодействия, определенного в рамках модели ЕАМ, были заимствованы из работы [3]. Для решения дифференциальных уравнений движения применялся скоростной алгоритм Верле с временным шагом 1 фс. Вычисления проводились с применением свободно распространяемого пакета молекулярно-динамического моделирования XMD [5]. На втором этапе в течение 90 пс температура кристалла понижается также в соответствии с заданным распределением. В ходе данных этапов проводится анализ структуры кристалла при помощи различных алгоритмов, которые будут указаны ниже. Визуализация исследуемой структуры осуществлялась при помощи пакета OVITO.

Атомы, которые по методы углов и связей Экланда-Джонса [4] не идентифицированы как располагающиеся в узлах ОЦК решетки, и в большей степени, которые могут быть рассмотрены как относящиеся к жидкой фазе. Для идентификации дислокационной линии использовался алгоритм, изложенный в работе [6]. Изображение межфазной границы в виде поверхности, построенной с применением метода триангуляционной сетки.

При моделировании кристалла, имеющего поверхность вдоль направления $[111]$, в

расчетной ячейке было идентифицировано две полные дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ с последующим их объединением и образованием дислокации $a \langle 100 \rangle$, что энергетически выгодно.

При создании поверхности вдоль направления $[11\bar{2}]$ образование дислокаций зафиксировано не было.

В обоих рассмотренных случаях дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ зарождаются на межфазной границе и скользят в плоскостях $\{112\}$ и $\{110\}$. Но в численном эксперименте, результаты, вектор Бюргерса дислокации коллинеарен вектору, соответствующему одному из ребер расчетной ячейки, что в рамках модели упрощает последующие оценки условий, необходимых для зарождения дислокации.

Общая протяженность формирующихся дислокационных линий увеличивается при возрастании плотности энергии имитируемого лазерного импульса, и, следовательно, увеличении температуры расчетной ячейки.

Исследование проводилось в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00087-2401.

Библиографический список

1. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Моделирование структурных изменений поверхностного слоя ОЦК-металла при кратковременном высокоэнергетическом воздействии методом молекулярной динамики // *Металловедение и термическая обработка металлов*. 2022. №5 (803). С.16-21.

2. Маркидонов А.В., Гостевская А.Н., Громов В.Е., Старостенков М.Д., Зыков П.А. Моделирование структурных изменений в поверхностном слое деформированного ОЦК-кристалла при кратковременном внешнем высокоинтенсивном воздействии // *Деформация и разрушение материалов*. 2022. №8. С.2-8.

3. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое моделирование уменьшения пористости поверхностного слоя ОЦК-кристалла, вызванной воздействием лазерных импульсов // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2023. Т.20. №2. С.168-175.

4. Mendeleev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystal-line and liquid iron // *Philosophical Magazine*. 2003. V.83. №35. Pp.3977-3994.

5. XMD - Molecular Dynamics Program. URL: <https://xmd.sourceforge.net>.

6. Stukowski A., Albe K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. V.18. №8. 085001.

УДК 621.762

ОЦЕНКА МЕХАНИЗМОВ УПРОЧНЕНИЯ УМЗ-ТИТАНА, ИМПЛАНТИРОВАННОГО ИОНАМИ АЛЮМИНИЯ

Никоненко А.В.¹, Попова Н.А.², Никоненко Е.Л.²

¹*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
Томск, Россия, E-mail: aliska-nik@mail.ru*

²*Томский государственный архитектурно-строительный университет
Томск, Россия*

Аннотация. Методом просвечивающей электронной микроскопии изучена тонкая структура технического чистого титана ВТ1-0 в ультрамелкозернистом (УМЗ) состоянии, имплантированного ионами алюминия. Установлено, что в процессе имплантации формируется градиентная структура, состоящая из 5 различных слоев: 1 – оксидный слой; 2 – ионно-легированный слой; 3 – слой измельченной зеренной структуры; 4 – слой остаточного влияния имплантации; 5 – слой исходной зеренной структуры. Также установлено, что

Научное издание

**Материалы во внешних полях
(МВП–2024)**

20 марта 2024

Труды

XII МЕЖДУНАРОДНОГО ОНЛАЙН СИМПОЗИУМА

Под общей редакцией
Компьютерная верстка
Технический редактор

В.Е. Громов
А.Н. Гостевская
А.А. Серебрякова

Подписано в печать 19.04.2024

Формат бумаги 60×84 1/16. Бумага писчая. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 6.04. Уч.-изд. л. 6.85. Тираж 500 экз. Заказ № 68

Сибирский государственный индустриальный университет
654007, Кемеровская область – Кузбасс, г. Новокузнецк,
ул. Кирова, зд. 42, Издательский центр СибГИУ