

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЧНОСТНЫХ И ПЛАСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАГНИЯ

<sup>1,2</sup>Власова А.М.

<sup>1</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Уральский федеральный университет имени Первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

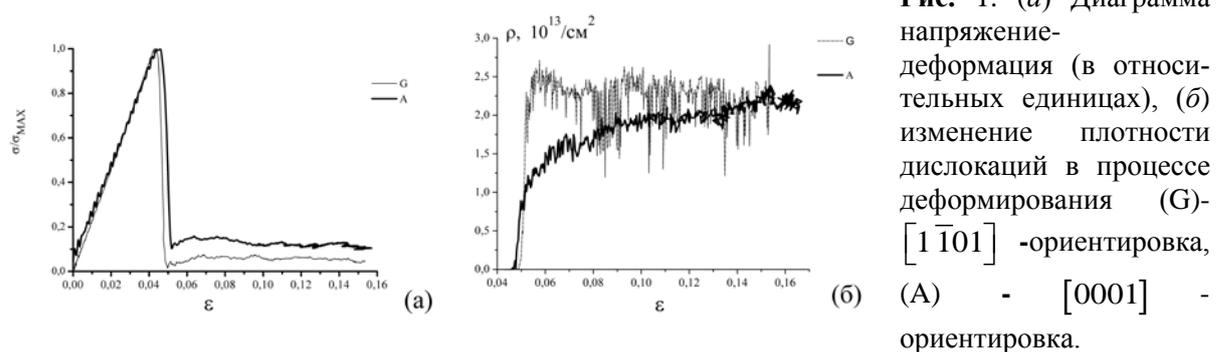
[alisa@imp.uran.ru](mailto:alisa@imp.uran.ru)

Пластическая деформация – неоднородный процесс, хотя на макроуровне, за счет усреднения по большому числу частиц, неоднородность оказывается замаскированной и уходит на второй план. Однако именно неоднородность является фундаментальной характеристикой деформации, без которой невозможна многоуровневая трактовка сложных деформационных процессов. В работе приводится моделирование высокоскоростного пластического течения ( $\nu = 3 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$ ) нанокристаллов магния различных ориентировок, а также образование и распространение трещин.

Моделирование проводилось с использованием вычислительного пакета LAMMPS. Потенциал межатомного взаимодействия взят из работы [1].

Моделируемые ячейки были выбраны в форме прямоугольных параллелепипедов размерами  $9.7 \times 22.1 \times 41.4 \text{ нм}$ , ребрам которой соответствовали кристаллографические направления  $\mathbf{X} = [\bar{1}\bar{1}20]$ ,  $\mathbf{Y} = [\bar{1}101]$ ,  $\mathbf{Z} = [\bar{1}10\bar{1}]$  (ориентировка  $[1\bar{1}01]$ ), и размерами  $19.1 \times 22.1 \times 31.2 \text{ нм}$ , ребрам которой соответствовали кристаллографические направления  $\mathbf{x} = [\bar{1}100]$ ,  $\mathbf{y} = [1\bar{1}20]$ ,  $\mathbf{z} = [0001]$  (ориентировка  $[0001]$ ).

Приводятся расчетные кривые напряжение-деформация для указанных ориентировок (рис.1а). Рассчитано изменение дислокационной плотности в процессе деформации (рис.1б). Показано, что в случае  $[0001]$ - и  $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов магния накопление дислокаций, в соответствии с экспериментальными данными для любых деформированных металлов, не превышает плотности в  $10^{12} - 10^{13} \frac{1}{\text{см}^2}$ .



**Рис. 1.** (а) Диаграмма напряжение-деформация (в относительных единицах), (б) изменение плотности дислокаций в процессе деформирования (G)-  $[1\bar{1}01]$  -ориентировка, (A) -  $[0001]$  - ориентировка.

Расчеты проводились на суперкомпьютере «Уран» ИММ УрО РАН.

Работа выполнена в рамках государственного задания «Давление» Г.р.

№ 122021000032-5

1. D. Y. Sun, M. I. Mendeleev, C. A. Becker, K. Kudin, Tomorr Naxhimali, M. Asta, J. J. Hoyt, A. Karma, and D. J. Srolovitz Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals: A molecular dynamics study of Mg. Phys. Rev. B 73, 024116 (2006).