# ВЛИЯНИЕ АТОМОВ ВОДОРОДА НА НАПРЯЖЕНИЕ ТЕЧЕНИЯ В AL-CU СПЛАВЕ

Безбородова П.А., Красников В.С., Майер А.Е.

*Челябинский государственный университет, Челябинск*
ibragimova-polin@mail.ru

В настоящей работе проведено многомасштабное исследование роли водорода, накопленного на θ′ фазах, на механические свойства Al-Cu сплава. На уровне атомистического моделирования впервые проведено исследование механизмов взаимодействия дислокации с упрочняющим включением в зависимости от содержащегося во включении водорода. Определены энергетически предпочтительные места расположения водорода вблизи упрочняющих включений θ'-фазы в Al-Cu сплаве. Система с максимальным содержанием водорода демонстрирует при комнатной температуре тенденцию к поглощению атомов водорода, изначально расположенных на межфазной границе. Показано, что накопление водорода в объеме θ' вызывает снижение сопротивляемости включения к сдвигу и вызывает смену механизма взаимодействия от формирования петли Орована к перерезанию включения. Этот результат получен в МД для двух рассмотренных размеров включения: 5 и 10 нм.

Взаимодействие дислокаций с включением исследовано с использованием программного пакета LAMMPS [1]. Взаимодействие атомов описывается BOB потенциалом [2]. Анализ и визуализация полученных атомных распределений осуществляется с помощью пакета OVITO [3].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-71-10038

[1] S.Plimpton, J. Comput. Phys. 117 (1995).
[2] X. Zhou, D. Ward, M. Foster. New J. Chem. 42, 5215-5228 (2018).
[3] A.Stukowski, Mater. Sci. Eng. 18, 015012 (2010).