

и $\dot{\varepsilon}_2$, например, $\dot{\varepsilon}_1 = 10 \dot{\varepsilon}_2$. Исходя из определения предела пропорциональности, с учетом того, что на упругом участке кривые нагружения при различных $\dot{\varepsilon}$ совпадают, получим из (5) такое соотношение для скорости упрочнения на пределе пропорциональности:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\varepsilon} &= M - \frac{A_1}{\dot{\varepsilon}_1} (\sigma_{\text{пц.1}} - \sigma_0)^n = \\ &= M - \frac{A_1}{\dot{\varepsilon}_2} (\sigma_{\text{пц.2}} - \sigma_0)^n, \end{aligned}$$

откуда следует

$$\frac{A_1}{\dot{\varepsilon}_1} (\sigma_{\text{пц.1}} - \sigma_0)^n = \frac{A_1}{\dot{\varepsilon}_2} (\sigma_{\text{пц.2}} - \sigma_0)^n,$$

$$\text{или} \left(\frac{\sigma_{\text{пц.1}} - \sigma_0}{\sigma_{\text{пц.2}} - \sigma_0} \right)^n = \frac{\dot{\varepsilon}_1}{\dot{\varepsilon}_2} = 10.$$

$$\frac{\sigma_{\text{пц.1}} - \sigma_0}{\sigma_{\text{пц.2}} - \sigma_0} = \sqrt[n]{10},$$

$$\text{или} \sigma_{\text{пц.1}} = \sqrt[n]{10} (\sigma_{\text{пц.2}} - \sigma_0) (\sqrt[n]{10} - 1).$$

Для высоких скоростей деформирования, аналогично с вышеизложенным, можно не учитывать σ_0 , тогда можно сделать вывод о том, что отношение пределов пропорциональности для различных скоростей нагружения независимо от объекта и конкретной скорости практически постоянно и, в нашем случае, равно $\sqrt[4]{10} \approx 1,8$, что подтверждается данными рис. 1 (несо-

ответствие экспериментальных и теоретических зависимостей $\sigma_{0,05}(f)$ около 5 %).

Отсюда следует интересный вывод: если в качестве характеристики деформирующего напряжения выбрать не деформацию, а скорость упрочнения в данной точке (по аналогии с пределом пропорциональности), то все рассуждения, проведенные в этой части, будут корректны для любой такой точки кривой деформации, то есть кривые $\sigma(\varepsilon)$ для различных скоростей нагружения качественно подобны, откуда следует возможность теоретического расчета деформационных кривых для различных скоростей нагружения с использованием формулы (5) на основании данных РН.

Отсутствие допущений, сужающих общую постановку упруго-пластической задачи, свидетельствует о применимости использованной схемы расчета на основе данных РН, технической теории постоянной скорости ползучести и уравнения (5) не только для кривых растяжения, но и для других режимов деформирования композиций в исследованном интервале температур и скоростей деформации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ильинский А.И. Структура и прочность слоистых и дисперсно-упрочненных пленок. М., 1986. 142 с.
2. Ильинский А.И., Фукс М.Я., Аринкин А.В. и др. // ФММ. 1985. Т. 60. Вып. 5. С. 58.
3. Доценко В.И., Ландау А.И., Пустовалов В.В. Современные проблемы низкотемпературной пластичности материалов. Киев, 1987. 162 с.
4. Борздыка А.М., Гецов Л.Б. Релаксация напряжений в металлах и сплавах. М., 1978. 256 с.
5. Хири П.Б., Хэмфри Ф.Дж. // Физика прочности и пластичности / Под ред. Л.К. Гордиенко. М., 1972. С. 158.
6. Малинин Н.Н. Ползучесть и обработка металлов. М., 1986. 210 с.
7. Пуарье Ж.П. Высокотемпературная пластичность кристаллических тел. М., 1982. 272 с.
8. Терлецкий А.С., Белова С.В. // Металлофизика. 1992. Т. 14. № 6. С. 68.

УДК 539.124

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОХЛАЖДЕНИЯ АМОРФНОГО СПЛАВА

© И.Б. Волкова, М.А. Баранов, В.Я. Баянкин

Россия, Ижевск, Физико-технический институт УрО РАН

Volkova I.B., Baranov M.A., Bayankin V.Y. Simulation of amorphous alloy cooling. The molecular dynamics technique is used to investigate the cooling process of the amorphous alloy Fe₈₀B₂₀. The computer simulation results are compared to the real experimental data. A mechanism elucidating the resulting regularities is proposed.

Широко изучены процессы структурной релаксации и кристаллизации аморфных сплавов при средних температурах и температурах вблизи температуры кристаллизации. В то же время, влияние низкотемпературных обработок на структурные превращения и сегрегационные эффекты в поверхностных слоях аморфных систем практически не исследовано, поскольку, на первый взгляд, нет явных причин для каких-либо структурных превращений при охлаждении. Между тем данный вопрос, видимо, требует более тщательного внимания. Так, например, в работе [1] приведен це-

лый ряд экспериментальных эффектов, возникающих при низкотемпературном воздействии на аморфную систему (77–133 К).

Данная работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики некоторых экспериментальных данных, приведенных в работе [1], в которой исследовалось влияние выдержки при температуре жидкого азота магнетомягкого аморфного сплава Co₅₇Ni₁₀Fe₅Si₁₁B₁₇. Время выдержки составляло 10, 60 и 120 мин. При этом было выявлено, что низкотемпературное воздействие не приводит к заметным изменени-

ям структуры сплава, образцы остались рентгено-аморфными. В то же время, низкотемпературная обработка вызвала концентрационные изменения в поверхностных слоях сплава. Оценку поверхностного перераспределения компонентов аморфных сплавов производили методом оже-спектроскопии после очистки поверхности ($\approx 0,5$ нм), когда загрязнение и адсорбированные примеси на поверхности практически отсутствуют. Показано, что атомы металлоидов обогащают поверхность, а атомы Co и Ni обедняют. В работе [1] также указывалось, что подобное поведение компонентов наблюдалось при охлаждении аморфной системы Fe-Ni-P-B.

Для выявления механизма данного эффекта использовалось молекулярно-динамическое моделирование. Методом молекулярной динамики исследовался кристаллит сферической формы, состоящий из 769 атомов железа и 193 атомов бора, что соответствует составу $Fe_{80}B_{20}$. Температурный режим в компьютерном эксперименте был выбран таким образом, чтобы на поверхности кристаллита поддерживался постоянный градиент температур, равный 100 К/нм. Причем на поверхности образца поддерживалась постоянная температура 100 К, а в его глубине – 300 К. Глубина расчета составляла 60000 шагов, при временном шаге $2 \cdot 10^{-15}$ с. При таких временах невозможно полностью проследить за диффузионными процессами, но есть надежда, что удастся уловить некоторые тенденции.

Результатом компьютерного эксперимента явилось увеличение количества атомов бора на поверхности кристаллита. При этом число атомов железа на поверхности практически не менялось. Однако относительная концентрация и того, и другого компонента, естественно, изменилась соответствующим образом. На рис. 1 демонстрируется расчет относительной концентрации для 7 атомных слоев, причем отсчет ведется из глубины образца, поверхностный слой имеет порядковый номер 6. Из рисунка 1 следует, что обогащение поверхностных слоев идет, прежде всего, за счет более глубоких слоев (так, увеличение атомов в 6-м слое привело к уменьшению в 4-м). Аналогично, число атомов в 3-м слое увеличивается за счет атомов 1-го. В общем, возникает тенденция к увеличению относительной концентрации атомов бора на поверхности. Кроме того, в ходе компьютерного эксперимента было замечено, что миграция бора происходит в составе железо-борных кластеров. Об этом свидетельствует и анализ функции радиального распределения атомов. Подобные функции были получены при исследовании других воздействий на аналогичную систему и подробно изучены в работах [2, 3].

Анализируя результаты вычислительного эксперимента, можно сделать вывод о том, что, по крайней мере, на первом этапе эксперимента, связанного с охлаждением аморфной системы, перераспределение компонент происходит путем миграции атомов бора в составе железо-борных кластеров. Подобная миграция может быть описана в рамках теории движения макроскопических включений, разработанной Гегузиным и Кривоглазом и подробно изложенной в монографии [4]. Ранее в работах [2, 3] элементы этой теории применялись для описания перераспределения компонентов аморфизирующихся систем в условиях деформации изгибом и ионного облучения. Расчетные данные с использованием данной теории хорошо коррелировали с экспериментом. По всей вероятности, достижения

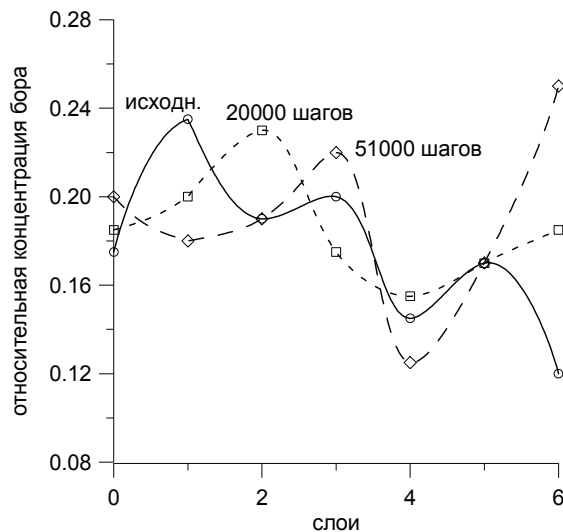


Рис. 1. Зависимость концентрации бора по глубине (6 атомный слой – поверхность) для различных времен охлаждения (1 шаг – $2 \cdot 10^{-14}$ с)

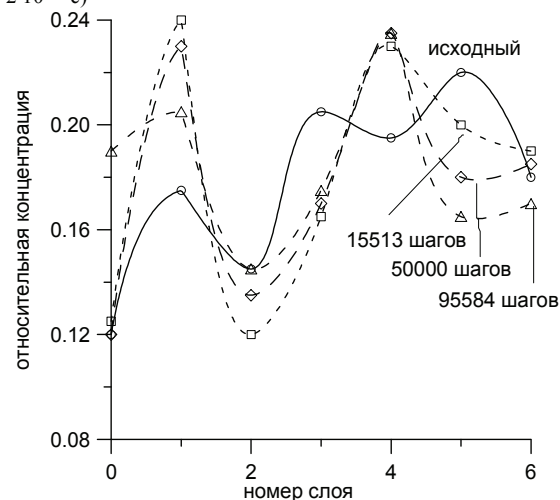


Рис. 2. Зависимость концентрации бора по глубине (6 атомный слой – поверхность) для различных времен нагрева (1 шаг – $2 \cdot 10^{-14}$ с)

указанной теории возможно применить и для описания поведения компонент аморфного сплава при охлаждении. Так, следуя работе [4], включение будет двигаться в поле градиента температур относительно поверхности со скоростью:

$$v = 2 \zeta \alpha T^{-1} D \nabla T_{\infty}, \quad (1)$$

где

$$\zeta = (\lambda - \lambda_0) / (2\lambda + \lambda_0), \quad (2)$$

λ и λ_0 в свою очередь, – теплопроводности матрицы и включения соответственно, α – безразмерное термодиффузионное соотношение (порядок которого составляет от 1 до 10), T – температура образца в месте нахождения включения, D – коэффициент самодиффузии атомов матрицы, ∇T_{∞} – градиент температуры вдали от включения. Для определения порядка и знака ζ можно сделать обоснованное рядом экспериментальных дан-

ных предположение о том, что металл-металлоидные кластеры могут быть зародышами кристаллической фазы и, следовательно, имеют ближний порядок. Тогда теплопроводность включения должна значительно превышать теплопроводность окружающей матрицы. В этом случае $\zeta \sim -1$. Следует отметить тот факт, что сама поверхность так же будет двигаться со скоростью:

$$v_{\text{пов}} = -\alpha T^{-1} D \nabla T_{\infty}. \quad (3)$$

Кстати, при построении подобных моделей часто не учитывается этот факт. Если принять вышеприведенные положения, то получается, что металл-металлоидные кластеры будут двигаться в направлении поверхности со скоростью, в три раза превышающей скорость движения самой поверхности. В этом случае будет наблюдаться эффект, сходный с эффектом, описанным в работе [1]. Попробуем оценить величину коэффициента диффузии, необходимую для того, чтобы было возможно объяснить изучаемый эффект в рамках описанной модели. Если предположить, что $v \sim 10^{-10}$ м/с, $\zeta = -1$, $\nabla T \sim 10^{12}$ К/м, $T \sim 300$ К, $\alpha \sim 10$, то $D \sim 10^{-21}$, что хорошо совпадает с данными работы [5]. При этом следует понимать, что основное перераспределение компонент будет происходить в области температуры 300 К. Если предложенный подход верен, то в случае разогрева поверхности аморфного сплава должно наблюдаться обратное перераспределение компонент. Подобное исследование было проделано в рамках метода молекулярной динамики. Параметры компьютерного эксперимента совпадали с параметра-

ми, указанными выше, но направление градиента температур было изменено на противоположное (результаты приведены на рис. 2). Видно хорошее качественное согласие с предложенной моделью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, методом молекулярной динамики исследовано поведение аморфной системы $\text{Fe}_{80}\text{V}_{20}$ при температурных воздействиях в области низких и высоких температур. Результаты компьютерного эксперимента находятся в качественном согласии с результатами реального эксперимента. Анализ полученных результатов позволил предложить механизм перераспределения компонентов (прежде всего, атомов металлоидов) в верхних слоях аморфной системы при температурном воздействии. В основе предложенной модели лежит теория движения макроскопических включений, подробно разработанная Гегузиным и Кривоглазом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Баянкин В.Я., Васильев В.Ю., Волкова И.Б. // *Металлы*. 1997. № 1. С. 164-167.
2. Волкова И.Б., Баранов М.А., Баянкин В.Я. // *Материаловедение*. 1998. № 6. С. 2-8.
3. Баранов М.А., Баянкин В.Я. // *Материаловедение*. 1999. № 4. С. 18-25.
4. Гегузин Я.Е., Кривоглаз М.А. Движение макроскопических включений в твердых телах. М.: *Металлургия*, 1971. 344 с.
5. Бокштейн Б.С., Клиггер Л.М., Уварова Е.Н. Аморфные металлические сплавы: Науч. тр. № 147. МИСиС / Под ред. Ю.А. Скакова. М.: *Металлургия*, 1983. С. 81-86.

УДК 669.715:669

ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕНЕНИЙ СТРУКТУРЫ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ ОТЖИГЕ СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА $\text{Al} - 3\% \text{Mg}$

© Н.К. Ценев, А.М. Шаммазов, В.Д. Суханов, Б.А. Козачук

Россия, Уфа, Государственный нефтяной технический университет

Tsenev N.K., Shammazov A.M., Suhanov V.D., Kozachuk B.A. Features of structure changes and mechanical properties during the annealing of submicrocrystalline of alloy $\text{Al} - 3\% \text{Mg}$. Using the pattern Al -based alloy ($\text{Al} - 3\% \text{Mg}$) processed by severe plastic deformation techniques, the article looks at the TEM studies of the specific submicrocrystalline (SMC) structure. The annealing of the alloy results in considerable changes in microstructure: grain boundary structure, grain size. It is revealed that abnormal grain growth leads to a sharp increase of lattice dislocation density enhancing the microhardness. Two possible reasons of the unusual behaviour in the SMC alloy during annealing are considered.

В последние годы субмикроструктурные материалы ($d < 1\mu\text{м}$), получаемые методами интенсивной пластической деформации, привлекают пристальное внимание специалистов в области физики прочности и пластичности [1–3]. Этот интерес обусловлен необычными механическими свойствами, проявляемыми СМК материалами: при комнатной температуре наблюдается одновременное повышение значений прочности и пластичности, обнаруживается эффект низкотемпературной высокоскоростной сверхпла-

стичности (НВССП) [4–6] и др. Очевидно, что столь необычное поведение СМК сплавов обусловлено протяженностью и состоянием границ зерен, их термостабильностью. Однако структурные изменения, происходящие в процессе роста зерен в таких материалах, практически не изучены. В этой связи данная работа посвящена экспериментальным наблюдениям изменений дислокационной структуры, происходящих при отжиге на примере субмикроструктурного модельного сплава $\text{Al} - 3\% \text{Mg}$.