

## **ДИСЛОКАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПОЛОС СДВИГА В АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛАХ**

Предложена дислокационная модель полосы сдвига, возникающей в аморфном материале при его пластической деформации. На основании модели предложены аналитические выражения для расчета компонент тензора напряжений у полосы сдвига. Рассмотрены особенности напряженного состояния, возникающего у полосы сдвига. Рассчитано распределение примесей у полосы сдвига в аморфном материале. Установлено, что примесь локализуется не у полосы сдвига, а вдали от нее. Это обусловлено специфической конфигурацией дальнедействующих полей напряжений. Повышение температуры способствует уменьшению концентрации примеси в местах ее максимальной локализации. Рассмотрено влияние полей напряжений полосы сдвига на формирование у нее различных фаз.

**1. Введение.** Теория пластической деформации аморфных материалов в настоящее время еще далека от своего завершения [1]. В этой связи, а также вследствие важности значения, которое приобретают аморфные материалы в технике [2], назрела необходимость в математическом моделировании явлений, наблюдаемых при деформировании конденсированных систем не имеющих дальнего порядка с целью прогнозирования и задания эксплуатируемым материалам необходимых свойств.

Для описания механизмов пластического течения аморфных материалов в настоящее время существуют различные модели: атомные [3, 4], микроструктурные [5–8], континуальные [9–12]. Однако наиболее распространенными, которые хорошо описывают локализованное в твердых телах напряженное состояние, являются дислокационные или микроструктурные модели.

При неомогенной пластической деформации аморфных сплавов в определенном температурном интервале пластическое течение локализуется в дискретных тонких полосах сдвига, тогда как остальной объем твердого тела остается недеформированным. При этом высота ступенек над поверхностью образцов, подвергнутых испытаниям пластической деформацией, достигает величины 0.1–0.2 мкм. Это объясняет очень большой запас локальной пластичности в области неомогенной деформации [1].

При изучении механизма неомогенной пластической деформации аморфной матрицы было замечено [13, 14], что она проходит три стадии: деформация происходит без фиксирования полос сдвига; сдвиговая деформация протекает путем образования и развития полос сдвига; деформация локализуется в некоторых полосах с образованием трещины в граничных областях полос сдвига. В процессе образования отдельных полос сдвига одновременно имеет место их взаимное пересечение и ветвление.

Авторы работы [13] в рамках моделей плоских скоплений промоделировали распределение сдвиговой деформации вдоль отдельной полосы. Данная теория качественно описывает эксперимент, но при условии введения подгоночного параметра – силы трения аморфной матрицы.

В соответствии с моделью Гильмана [15] пластическое течение реализуется путем движения дислокаций, у которых вектор Бюргерса изменяется по величине и на-

правлению. Это создает большую плотность дефектов типа дислокационных петель и разупорядочивает область аморфной матрицы в плоскости скольжения.

В других работах [16, 17] полоса сдвига в аморфном материале рассматривается как дислокация наиболее общего типа, где условие равновесия сводится к непрерывности нормального напряжения на поверхности разреза, а вектор их смещения является произвольной функцией точки на этих поверхностях, чье поле напряжений приводит к локализации процесса сдвига. Релаксация поля напряжений дислокаций требует атомных перемещений от ядра дислокации на всем пути к внешней поверхности.

Объяснение высокой локализации скольжения вытекает из снижения сопротивления сдвигу в результате химического и структурного разупорядочения в полосах сдвига [9].

Дислокационная модель обладает очевидным достоинством, – она с успехом оперирует математическим аппаратом теории дислокаций применительно к аморфным сплавам. Ряд моделей основано на дисклинационно-дислокационных механизмах пластического течения аморфных сплавов путем введения в идеальную кубическую и гранецентрированную плотноупакованные решетки трехмерной сетки дисклинационных диполей [8, 18]. Здесь знаки дисклинаций чередуются в шахматном порядке, между которыми находится подсетка краевых дислокаций, начала и концы которых заканчиваются на ступеньках дисклинаций с винтовыми компонентами. Недостаток данной модели заключается в неучете способности дисклинаций к консервативному движению за счет излучения краевых дислокаций.

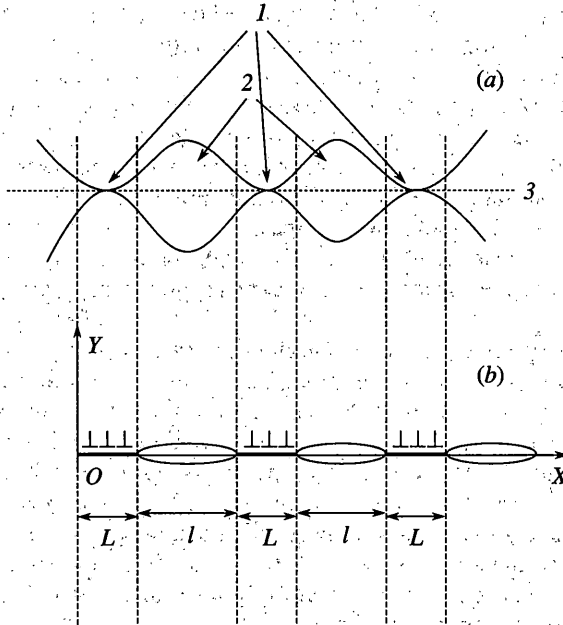
В [19, 20] описана модель эстафетного дисклинационно - дислокационного механизма низкотемпературной деформации, которая реализуется излучением и поглощением краевых дислокаций клиновыми дисклинациями. В соответствии с ней, выход дислокаций на поверхность приводит к образованию ступеньки, которая одновременно является дополнительным растущим концентратором напряжений, что приводит к развитию полосы сдвига. Это сопровождается взаимным скольжением частей образца друг относительно друга до достижения размеров ступенек некоторого критического значения, вызывающего зарождение трещины с раскрытием полосы сдвига, что приводит к образованию венообразного узора.

Вышесказанное дает возможность описывать характер локализованного пластического течения в аморфных сплавах, характер накопления в полосах, разупорядочение в областях пластического течения и других особенностей механического поведения аморфных сплавов.

Целью публикуемой работы явилось описание новой дислокационной модели для расчета напряженного состояния в полосе сдвига, возникающей в аморфном материале при его деформировании.

**2. Модель.** Полоса сдвига при негетогенной пластической деформации аморфных сплавов схематически может быть изображена в виде, представленном на фиг. 1, *a*. Данная схема предложена на основании детального изучения изображения полосы сдвига, полученного методом высокоразрешающей электронной микроскопии, представленной в работе [1]. Согласно предлагаемой дислокационной модели, поля напряжений в местах сцепления материала, находящегося по разные стороны плоскости сдвига, создаются скоплением краевых дислокаций, что подобно модели Билби – Коттрелла – Свиндена [21]. В результате имеем последовательное чередование пор и цепочек дислокаций, показанных на фиг. 1, *b*.

Для простоты расчетов и без ущерба для общности результатов исследований полагаются следующие допущения: длина цепочек дислокаций одинакова и равна  $L$ ; размеры пор также одинаковы и равны  $l$  (см. фиг. 1, *b*). В общем случае данные расстояния могут быть различными.



Фиг. 1

Свяжем начало прямоугольной декартовой системы координат с точкой  $O$  (см. фиг. 1,  $b$ ), расположенной у вершины скопления дислокаций. Направим ось  $X$  вдоль плоскости сдвига, а ось  $Y$  перпендикулярно ей. Тогда не трудно показать, что в общем виде выражение для определения тензора напряжения такой системы пор и цепочек дислокаций примет вид:

$$\sigma_{ij} = \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \sigma_{ij}(x + nd + m(1 + Nd), y) \quad (2.1)$$

где  $M = L_p / (L + l)$  ( $L_p$  – длина полосы сдвига) – число пор,  $N = L/d$  ( $d$  – расстояние между дислокациями в скоплении) – число дислокаций в скоплении,  $m$  и  $n$  – индексы суммирования.

В выражении (2.1) функции, описывающие компоненты тензора напряжений у полосы сдвига, имеют вид, близкий к виду функций для расчета полей напряжений у единичной дислокации [22]. Однако в данном выражении (2.1) имеет место замена  $x \rightarrow x + nd + m(l + Nd)$ . При этом компоненты тензора напряжений для рассматриваемой полосы сдвига можно найти из соотношений:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{y[3(x + nd + m(l + Nd))^2 + y^2]}{[(x + nd + m(l + Nd))^2 + y^2]^2} \\ \sigma_{yy} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{y[(x + nd + m(l + Nd))^2 - y^2]}{[(x + nd + m(l + Nd))^2 + y^2]^2} \\ \sigma_{zz} &= -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{y^2}{(x + nd + m(l + Nd))^2 + y^2} \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{m=0}^M \sum_{n=0}^N \frac{(x+nd+m(l+Nd))[(x+nd+m(l+Nd))^2 - y^2]}{[(x+nd+m(l+Nd))^2 + y^2]^2}$$

где  $\mu$  – модуль сдвига,  $b$  – вектор Бюргерса,  $\nu$  – коэффициент Пуассона.

Следует отметить, что в соотношениях (2. 1) и (2. 2) подразумевается, что все прочие цепочки дислокаций (помимо  $nd$ ) вносят вклад в напряжение целиком.

**3. Результаты расчетов напряженного состояния.** Результаты компьютерного расчета полей напряжений у полосы сдвига представлены на фиг. 2. Для удобства расчетов строились не зависимости  $\sigma_{ij} = f(x, y)$ , а аналогичные по виду функции  $\sigma_{ij}^* = f(x, y)$ , где  $\sigma_{xx}^* = -\sigma_{xx}/A$ ,  $\sigma_{yy}^* = \sigma_{yy}/A$ ,  $\sigma_{xy}^* = \sigma_{xy}/A$  ( $A = \mu b/[2\pi(1-\nu)]$ ),  $\sigma_{zz}^* = -\sigma_{zz}/B$  ( $B = \mu b\nu/[\pi(1-\nu)]$ ). При построении полей напряжений принималось  $M = 3$ ;  $N = 10$ ;  $d = 0.1$ ;  $l = 0.5$ . Начало координат графиков соответствуют вершине полосы сдвига. Последняя расположена в положительной области оси  $X$ , как это показано на рис. 1, б. Краевыми эффектами, связанными с наличием пор, в данной работе пренебрегалось. Это оправдано малым их размером (толщина пор соизмерима с межатомным расстоянием) по сравнению с площадью рассматриваемой области.

На фиг. 2, а представлено распределение нормальных напряжений  $\sigma_{xx}^*$  у полосы сдвига. Можно видеть, что рассматриваемые напряжения знакопеременны по отношению к плоскости, в которой находится полоса сдвига. Аналогичная ситуация наблюдается и для приведенной компоненты тензора напряжений  $\sigma_{yy}^*$  (фиг. 2, б). Нормальные напряжения  $\sigma_{xx}^*$  и  $\sigma_{yy}^*$  локализованы у полосы сдвига и убывают с удалением от нее.

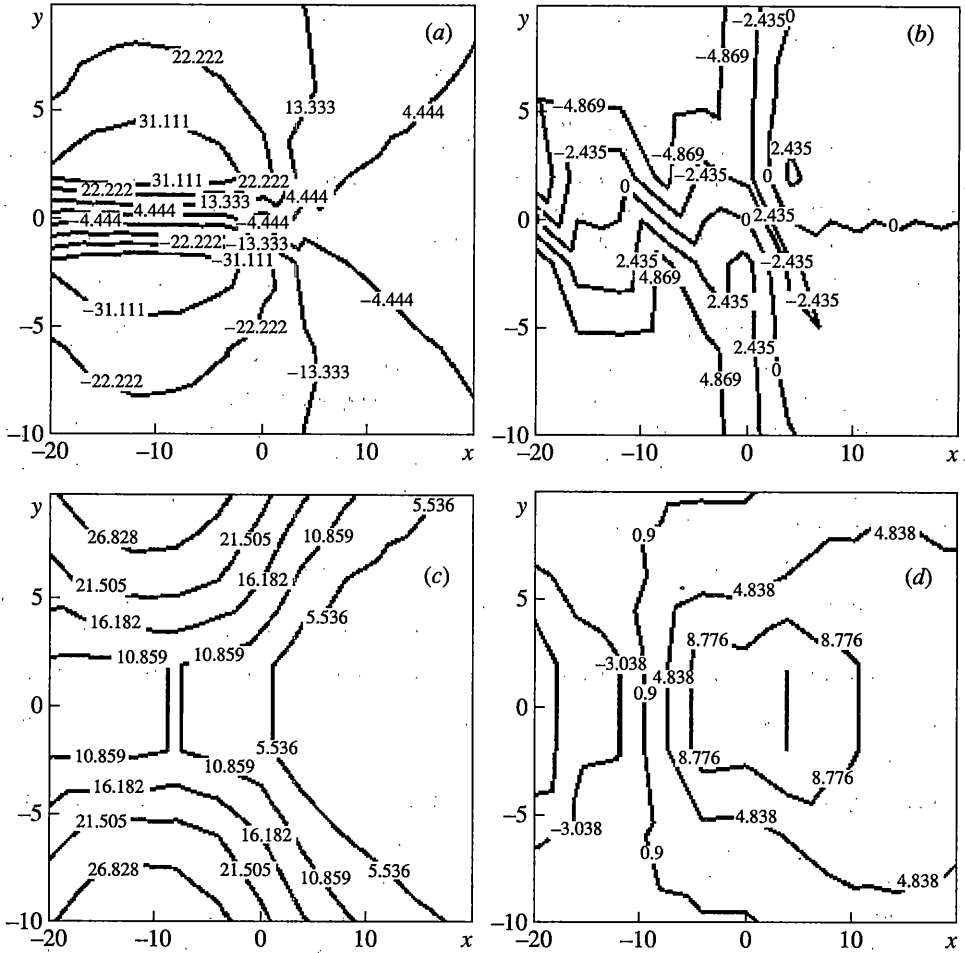
Иная ситуация наблюдается в случае напряжений  $\sigma_{zz}^*$ . Данные напряжения не знакопеременны и локализуются вдали от полосы сдвига (фиг. 2, с).

Скальвающие напряжения  $\sigma_{xy}^*$  меняют знак при переходе от устья полосы сдвига к ее вершине и далее (фиг. 2, d).

Хотя полученные результаты расчета полей напряжений являются осредненными, представленная модель, в отличие от предложенных ранее, учитывает особенности строения полосы сдвига, например, наличие микропор. В то же время, в отличие от модели Билби – Коттрелла – Свиндена, где напряженное состояние у вершины микротрещины описывалось краевыми дислокациями разного знака, в предлагаемой модели полоса сдвига моделировалась дислокациями одного знака. Это в большей степени соответствует физическому процессу формирования полосы сдвига.

Предложенная дислокационная модель полос сдвига в аморфных материалах, которая учитывает особенности их строения, отличается простотой, позволяет рассматривать процессы взаимодействия полосы сдвига с пустотами, примесями, дислокациями на мезоскопическом уровне, а также позволяет оценивать влияние основных структурных составляющих полос сдвига, таких как поры и области сцепления и т.д. на напряженное состояние материала.

Вместе с тем имеются некоторые моменты, которые данная модель не учитывает в силу сделанных допущений. К ним относятся невозможность рассмотрения явления образования полос сдвига на атомарном и макроскопическом уровнях, модель справедлива для однородной изотропной среды, не учитывающей реального строения аморфного материала, затруднен расчет полей напряжений, создаваемых большим количеством дислокаций, локализованных в полосе сдвига.



Фиг. 2

**4. Методика и результаты расчета распределения примесей у полосы сдвига.** В качестве примера применения полученных выше результатов рассмотрим распределение примесей у полосы сдвига. Концентрация примесей  $C$  у полосы сдвига может быть определена по формуле [23]:

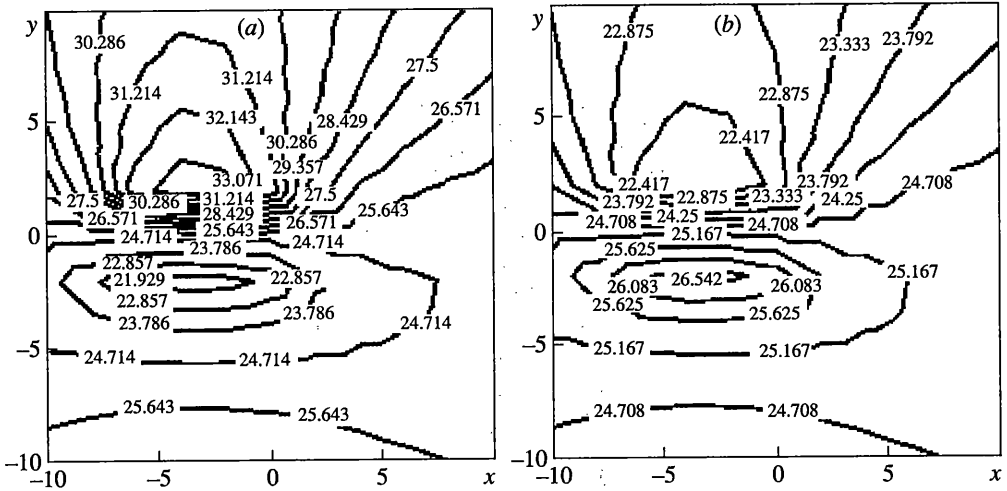
$$C = C_0 \exp(-U/(kT)) \quad (4.1)$$

где  $C_0$  – концентрация примеси вдали от внутренних источников напряжений,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура. Энергия  $U$  взаимодействия примеси с полосой сдвига определяется по формуле

$$U = -(4/3)\pi r^3 \varepsilon (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \quad (4.2)$$

где  $r$  – радиус атома матрицы,  $\varepsilon = (r_0 - r)/r$  – малый параметр ( $r_0$  – радиус атома примеси).

Подстановка в (4.2) выражений для нормальных компонент тензора напряжений, приведенных в первой части работы, а затем – (4.2) в (4.1), даст выражение для распределения примесей у полосы сдвига.



Фиг. 3

Интересны два случая:  $r_0 < r$  и  $r_0 > r$ . В данных случаях максимальная концентрация примесей будет иметь место с разных сторон полосы сдвига из-за различного знака величины  $U$ . Для примера произведем расчет распределения примесей в аморфном сплаве на основе железа ( $r_{Fe} = 1.27 \text{ \AA}$  [24]). В качестве легирующего компонента с малым атомным радиусом выберем бор ( $r_0 = 0.97 \text{ \AA}$  [24]), а с большим – молибден ( $r_0 = 1.4 \text{ \AA}$  [24]). Результаты расчета при  $T = 300 \text{ K}$  и  $C_0 = 25 \text{ ат. \%}$  приведены на фиг. 3, *a* и *b*.

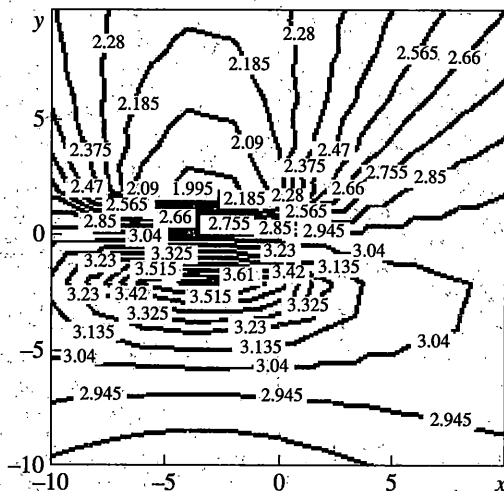
Отличительной особенностью распределения выбранных примесей у полосы сдвига является их локализация вдали от нее. В рассмотренных примерах и представленных на фиг. 3 максимальная концентрация атомов бора и молибдена наблюдается в области удаленной от полосы сдвига на расстоянии порядка 2 мкм. Причем, в противоположных, симметричных по отношению к полосе сдвига областях наблюдается обеднение ее примесями.

Следует подчеркнуть общеизвестный факт, что область локализации примесей в полях напряжений полосы сдвига определяется их радиусами, а также радиусом атомов матрицы. В связи с этим атомы бора локализуются в положительной по отношению к оси  $Y$  полуплоскости, а атомы молибдена – в отрицательной (фиг. 3).

Кроме того, рассчитывалось влияние температуры на распределение примеси у полосы сдвига. Было установлено, что повышение температуры практически не изменяет места максимальной локализации примеси. Однако концентрация примеси в этой области с повышением температуры уменьшается.

Избыточная концентрация по отношению к  $C_0$  атомов в отдельных областях приводит к образованию фаз, наблюдение которых вдали от концентраторов напряжений невозможно. С другой стороны, в областях обеднения примесными атомами возможен распад существующих фаз. Предложенная модель позволяет определять вероятное распределение фаз в области полосы сдвига. В случае наличия матрицы из атомов железа вероятная фаза, которая образуется в области полосы сдвига, может быть найдена из соотношения

$$x/y = C_{Fe}/C \tag{4.3}$$



Фиг. 4

где  $x$  и  $y$  – индексы в формуле  $Fe_xN_y$ , (здесь  $N$  – знак атома примеси);  $C_{Fe}$  – концентрация атомов железа,  $C$  – концентрация примесных атомов (в мас. % или ат. %). Тогда (4.3) в случае двухкомпонентной системы можно записать как

$$x/y = (100 - C)/C \quad (4.4)$$

Подстановка (4.1) в (4.4) даст выражение для определения распределения фазы типа  $Fe_xN_y$  полосы сдвига. В случае многокомпонентной системы, в которой имеет место более, чем одна примесь, концентрация атомов железа находится из соотношения  $C_{Fe} = 100 - C - C_1$ , где  $C_1$  – суммарная концентрация всех, кроме компоненты  $N$ , примесей в заданной области и, рассчитанная по формуле (4.1), где  $U$  рассчитано с учетом радиуса заданной примеси.

При расчете распределения фаз типа  $Me_xMe_y$ ,  $Me_xN_y$ ,  $M_xN_y$ , где  $Me_y$  – металл, а  $M_x$  – неметалл, можно использовать соотношение

$$x/y = C_2/C_3 \quad (4.5)$$

где  $C_2$  и  $C_3$  – концентрации соответствующих примесей, рассчитанные по формуле (4.1) с учетом радиусов данных примесей.

В качестве примера рассмотрим трехкомпонентную систему Fe–Mo–В. Пусть концентрации элементов системы будут следующими: Fe – 60 ат. %, Mo – 30 ат. %, В – 10 ат. %. Для фазы типа  $Mo_xV_y$  из (4.5) для функции

$$\frac{x}{y} = \frac{C_{Mo}}{C_V} = \frac{C_{0,Mo}}{C_{0,V}} \exp\left(\frac{4}{3} \frac{1}{kT} \pi r^3 (\epsilon_{Mo} - \epsilon_V) (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})\right) \quad (4.6)$$

$$\epsilon_{Mo} = (r_{Mo} - r_{Fe})/r_{Fe}, \quad \epsilon_V = (r_V - r_{Fe})/r_{Fe}$$

будем иметь распределение, представленное на фиг. 4. Видно, что при заданных концентрациях при  $T = 300$  К и при указанных выше параметрах полосы сдвига в положительной области относительно оси  $Y$  благоприятны условия для образования фазы типа  $Mo_2V$ , а в отрицательной –  $Mo_3V$ .

**5. Заключение.** Предложена новая дислокационная модель полосы сдвига аморфного материала, учитывающая особенности строения полосы. На основании данной

модели получены аналитические выражения для компонент тензора напряжений, возникающих у полосы сдвига, рассмотрены конфигурации этих полей напряжений.

На основании дислокационной модели предложен метод расчета распределения примеси различного радиуса в полях гидростатических напряжений у полосы сдвига в аморфном материале. Установлено, что максимальная концентрация примеси имеет место вдали от полосы сдвига. Повышение температуры способствует уменьшению концентрации примеси в области ее максимальной концентрации. Предложен метод расчета благоприятных областей у полосы сдвига для зарождения различных фаз.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Глезер А.М., Молотилов Б.В. Структура и механические свойства аморфных сплавов. М.: Металлургия, 1992. 208 с.
2. Верецагин М.Н., Горанский Г.Г. Исследование особенностей структурообразования износостойких аморфизированных покрытий самофлюсующихся сплавов на основе железа // Трение и износ. 1997. Т. 18. № 6. С. 827–831.
3. Weaire D., Ashby M.F., Logan J. Weins M.J. On the use of pair potentials to calculate the properties of amorphous metals // Acta Met. 1971. V. 19. № 8. P. 779–788.
4. Argon A.S., Kuo H. Y. The structure of and plastic flow in a Bragg bubble gas. Rapidly quenched metals: 3 rd. Intern. Conf. B. Contor. London: Chameleon Press, 1978. V. 2. P. 269–276.
5. Li J.C.M. Metallic Glasses (ASM Seminar, 1976). P. 224–246. American Society of Metals, 1978.
6. Gillman J.J. Mechanical behavior of metallic glasses // J. Appl. Phys. 1975. V. 46. № 4. P. 1625–1633.
7. Hirth J.P. Mechanism of shear of an amorphous metal // J. Mater. Sci. 1977. V. 12. № 12. P. 2540–2542.
8. Morris R.C. Disclination-dislocation model of metallic glass structure // J. Appl. Phys. 1979. V. 50. № 5. P. 3250–3257.
9. Polk D.E., Turubull D. Flow of melt and forms of metallic alloys // Acta Met. 1972. V. 20. № 4. P. 493–498.
10. Takayama S., Maddin R. Fracture of amorphous Ni-Pd-P // Phil. Mag. 1975. V. 32. № 2. P. 457–470.
11. Chen H.S. Stored energy in a cold-rolled metallic glass // Appl. Phys. Lett. 1976. V. 29. № 6. P. 328–330.
12. Chen H.S. Metallic glasses. Review. // Mater. Sci. Eng. 1976. V. 25. Sept. P. 59–69.
13. Zielinski P.G., Ast D.G. Slip bands in metallic glasses // Phil. Mag. 1983. V. 48 a. № 5. P. 811–824.
14. Neuhauser H. Rate of shear band formulation in metallic glasses // Scr. Met. 1978. V. 12. № 5. P. 471–474.
15. Gilman J.J. Flow via dislocations in ideal glasses // J. Appl. Phys. 1973. V. 44. № 2. P. 675–679.
16. Li J.C.M. Mechanical properties of amorphous metals // Proc. Fourth Intern. Conf. Rapid Quench. Metals, Sendai, Japan: Inst. Metals. 1982. V. 2. P. 1335–1340.
17. Li J.C.M. // Amer. Soc. Metals, Cleveland. 1978. 224 p.
18. Зайченко С.Г., Борисов В.Т. Дисклинационная модель пластической деформации аморфных металлических сплавов // Докл. АН СССР. 1982. Т. 263. № 3. С. 622–626.
19. Зайченко С.Г., Борисов В.Т., Брагинский А.П. и др. // Строение и природа металлических и неметаллических стекол. Ижевск.: Удмур. гос. ун-т. 1987. С. 100–101.
20. Дэвис Л.А. Прочность, пластичность, вязкость разрушения. // Металлические стекла. М.: Металлургия, 1984. С. 150–173.
21. Владимиров В.И. Физическая природа разрушения металлов. М.: Металлургия, 1984. 280 с.
22. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
23. Предводителев А.А., Тяпунина Н.А., Зиленкова Г.М., Бушуева Г.В. Физика кристаллов с дефектами. М.: Изд-во МГУ, 1986. 238 с.
24. Верецагин М.Н., Горанский Г.Г., Голубцова Е.С. Взаимосвязь структуры и механических свойств аморфных сплавов на железной основе // Расплавы. 1999. № 4. С. 40–51.