

М.Ю. Барабаш¹, Л.Ю. Куницька², Ю.А. Куницький¹

Фізична модель напружень в аморфних сплавах

¹Технічний центр НАН України,
вул. Покровська, 13, Київ, 04070 Україна,
38(044) 4242348, nanosys@imp.kiev.ua

²Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України,
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна, nanosys@imp.kiev.ua

Розглянуто дефекти атомного і локального рівнів будови аморфних матеріалів. Відмічено, що неоднорідності атомного рівня – невід’ємна частина аморфної структури. Розглянуто дефекти мікроскопічного та макроскопічного рівнів будови і неоднорідності, які вносяться технологією гартування. Встановлено зв’язок напружень і структурних неоднорідностей.

Ключові слова: аморфні сплави, дефекти структури, напруження, малокутове рентгенівське розсіювання.

Стаття постуила до редакції 07.12.2008; прийнята до друку 15.06.2009.

Вступ

При описі властивостей аморфних сплавів (АС) необхідно враховувати наявність у них мікрооб’ємів, що істотно відрізняються за густиною, складом, структурними параметрами від середніх значень цих величин по макрооб’єму, визначених різними методами [1-6]. Це обумовлено тим, що формування АС здійснюється за нерівноважних умов значних градієнтів температури ($\nabla T = 10^6 \dots 10^8 \text{ K}/\text{м}$) та високих швидкостей охолодження розплаву ($dT/dt = 10^4 \dots 10^8 \text{ K}/\text{с}$). Внаслідок цього розподіл величини та характеру орієнтації сил міжатомної взаємодії не є однорідним, а діючі в деякому об’ємі середні сили залежать від розмірів області усереднення та їх просторового розташування. Ці сили визначають внутрішні напруження у розглянутому об’ємі матеріалу. Електронно-мікроскопічними дослідженнями [3-6], а також експериментами з малокутового рентгенівського розсіювання [7-9] встановлена наявність в АС структурних і концентраційних неоднорідностей та флуктуації густини в межах 2...10%. Розміри, форма та орієнтація просторових неоднорідностей визначаються переважно кінетикою гартування розплаву, релаксаційними процесами та силами міжатомної взаємодії.

Мета даної роботи – розробка фізичної моделі напружень в аморфних сплавах різної природи.

І. Фізична модель напружень

Розглянемо структурну неоднорідність, яка знаходиться в аморфній матриці. Нерівномірний розподіл атомів призводить до виникнення в «граничній» області некомпенсованих сил та, відповідно, пружних напружень у середині неоднорідності та у матриці. Для їх оцінки розіб’ємо граничну область (L_i) на шари рівної товщини, величина яких визначається середньою міжатомною відстанню $\langle r_{at} \rangle$ (рис. 1,а).

При цьому кількість атомів сорту α ($\alpha=A, B, \dots$) у

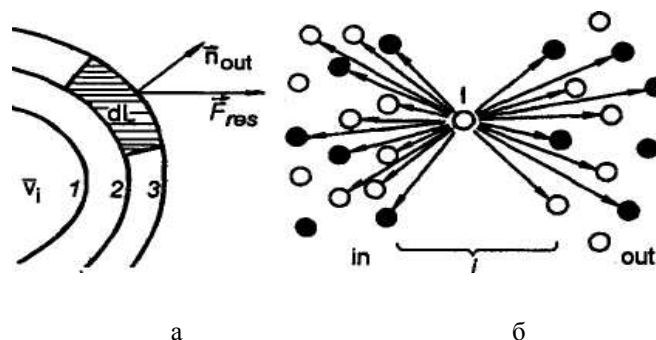


Рис. 1. Сили, що діють на елемент шару 2 (а) та на атом l шару j з боку навколишніх шарів (б): о – атом сорту A ; • – атом сорту B

шарі з номером v дорівнює $N_v^{\alpha_i} = S_v^i \cdot \rho_v^{\alpha_i}$, де i – номер неоднорідності, S_v – площа середньої поверхні шару

ν , $\rho_{\nu}^{\alpha_i}$ – густина атомів сорту α_i у шарі ν . Припустимо, що атоми першого шару взаємодіють лише з атомами внутрішньої області (V_i), що прилягають до границі, і атомами шару 2, атоми шару 2 – з атомами шарів 1 й 3 і т.д.

Таким чином, взаємодія атомів шару ν с атомами шарів $\nu \pm 1$, опосередковано. Результуючу силу, що діє на елемент dL^{ν} шару ν можна записати у вигляді

$$\vec{F}_{res}^{\nu} = \sum_{l,m}^{(\nu-1)} \vec{f}_{lm} - \sum_{l,k}^{(\nu+1)} \vec{f}_{lk}, \quad (1)$$

де \vec{f}_{lm} – сила, що діє між атомами з номерами l та m (рис.1, б). Сила, що діє на атом l шару ν з боку шару

$(\nu-1)$, рівна

$$\vec{F}_{in}^{\nu}(l) = \sum_m \vec{f}_{lm}^{\alpha\alpha'} = \sum_{\alpha'} \sum_m \int_{dL^{\nu}} \vec{f}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_l - \vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}_m) C_{\alpha'}(\vec{r} - \vec{r}_m) d\vec{r} \quad (2)$$

де

$$C_{\alpha'}(\vec{r} - \vec{r}_m) = \begin{cases} 1, & \text{якщо в околі } \vec{r}_m \\ & \text{знаходиться атом } \alpha'; \\ 0, & \text{якщо ні.} \end{cases}$$

Тоді сила, що діє на елемент dL^{ν} з боку сусідніх шарів, дорівнює

$$\vec{F}(dL^{\nu}) = \sum_l \sum_{\alpha} \left[\sum_m \int_{dL^{\nu}} \vec{f}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_{l2}) \delta(\vec{r}_{l1}) C_{\alpha}(\vec{r}_{l1}) \delta(\vec{r}_{2m}) C_{\alpha'}(\vec{r}_{2m}) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \sum_{\alpha'} \sum_k \int_{dL^{\nu}} \vec{f}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_{l2}) \delta(\vec{r}_{l1}) C_{\alpha}(\vec{r}_{l1}) \delta(\vec{r}_{2k}) C_{\alpha'}(\vec{r}_{2k}) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \right], \quad (3)$$

де $\vec{r}_{l2} = \vec{r}_l - \vec{r}_2$ і $\vec{f}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_{l2}) = \frac{\partial U(\vec{r}_{l2})}{\partial \vec{r}_{l2}}$; $U^{\alpha\alpha'}(r)$ – потенціал взаємодії атомів сорту α і α' ; C_{α} – середнє значення концентрації елемента сорту α .

Після усереднення з урахуванням зміни характеру розташування атомів, одержимо:

$$\vec{F}(dL^{\nu}) = \sum_{\alpha, \alpha'} n_{(\nu)}^{\alpha} n_{(\nu+1)}^{\alpha'} \int_{dL^{\nu}} \int_{dL^{\nu+1}} \vec{f}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_{l2}) f_{2(\nu+1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \sum_{\alpha, \alpha'} n_{(\nu)}^{\alpha} n_{(\nu-1)}^{\alpha'} \int_{dL^{\nu}} \int_{dL^{\nu-1}} \vec{f}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_{l2}) f_{2(\nu-1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (4)$$

де $n_{(\nu)}^{\alpha}$ – середня щільність частинок сорту α у шарі ν ; $f_{2(\nu+1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – двочастинкова функція кореляції, введена відповідно до визначення [5,9-11]:

$$f_2^{\alpha\alpha'}(r_1, r_2) = \frac{1}{V^2} \times \int_V \delta(\vec{r}_1 - \vec{R}_l) C_{\alpha}(\vec{r}_1 - \vec{R}_l) \delta(\vec{r}_2 - \vec{R}_2) C_{\alpha'}(\vec{r}_2 - \vec{R}_2) f_N^{\alpha\alpha'}(\vec{R}_N) d\vec{R}_3, \quad (4')$$

Функції $f_{2(\nu+1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ та $f_{2(\nu-1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ відрізняються на величину $\Delta f_2^{\alpha\alpha'} = 2df_{2(\nu+1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{h} \langle r_{at} \rangle$, де \vec{h} – нормаль до границі.

Якщо відомі зміни щільності n_{ν} і концентрації $(C_{\alpha} - C_{\alpha'})$ при переході через границю структурна неоднорідність-матриця, зручно використати формулу

$$\vec{F}(dL^{\nu}) = \sum_{\alpha, \alpha'} (n_{(\nu)}^{\alpha})^2 C_{\alpha} C_{\alpha'} \times \int_{dL^{\nu}} \int_{dL^{\nu}} \vec{f}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_{l2}) f_{lv}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_l) \cdot [f_{l(\nu+1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_2) - f_{l(\nu-1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_2)] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (5)$$

Тут функції

$$f_l^{\alpha}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \int_V \delta(\vec{r} - \vec{R}_l) C_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}_l) f_N(\vec{R}_N) d\vec{R}_2 \dots d\vec{R}_N \quad (5')$$

нормовані на одиницю об'єму V ;

$$f_{l(\nu+1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}) - f_{l(\nu-1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}) = 2 \frac{df_l^{\alpha}(\vec{r})}{dh} \langle r_{at} \rangle.$$

Об'єми V_{ν} і $V_{\nu \pm 1}$ вважаються рівними, оскільки за достатнього віддалення точки r_2 від dL^{ν} , $f^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_{l2})$ стає рівної нулю. Формула (4) переходить в (5) за умови $f_{l(\nu+1)}^{\alpha\alpha'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f_l^{\alpha}(\vec{r}_1) f_2^{\alpha'}(\vec{r}_2)$.

Загальна сила, що діє на елемент поверхні dL , дорівнює

$$\vec{F}_{dL}^{res} = \sum_{\nu} \vec{F}_{dL^{\nu}}.$$

Для розрахунку величини енергії натягу $U_n(\vec{R}_n)$ скористаємося наближенням парної взаємодії [7]. Запишемо:

$$U_n(\vec{R}_n) = U^{\alpha\alpha'}(\vec{R}_n) + \Delta H, \quad (6)$$

де $U^{\alpha\alpha'}(\vec{R}_n)$ – внутрішня енергія однорідної системи, що залежить від енергії взаємодії n частинок, ΔH – описує зміну цієї енергії при русі уздовж нормалі до границі. Оскільки зміна енергії системи атомів ΔH , пов'язаних із границею, невелика (у протилежному випадку система не могла б бути стійкою), то

$$\Delta H = \frac{\partial U^{\alpha\alpha'}(\vec{R}_n)}{\partial \vec{h}} \Delta \vec{h}. \quad (7)$$

Якщо уздовж \vec{h} змінюються значення n та C_{α} , то обмежуючись членами другого порядку, отримаємо:

$$\Delta H = \left[\frac{\partial U^{\alpha\alpha'}}{\partial n} \frac{dn}{d\bar{h}} + \sum_{\alpha} \frac{\partial U^{\alpha\alpha'}}{\partial C_{\alpha}} \frac{dC_{\alpha}}{d\bar{h}} \right] \Delta\bar{h} + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}}{\partial n^2} \left(\frac{dn}{d\bar{h}} \right)^2 + 2 \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}}{\partial C_{\alpha} \partial n} \frac{dC_{\alpha}}{d\bar{h}} \frac{dn}{d\bar{h}} + \sum_{\alpha, \alpha'} \frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}}{\partial C_{\alpha} \partial C_{\alpha'}} \frac{dC_{\alpha}}{d\bar{h}} \frac{dC_{\alpha'}}{d\bar{h}} \right] (\Delta\bar{h})^2. \quad (8)$$

Залежність $U^{\alpha\alpha'}$ від щільності n пов'язана зі зміною середніх міжатомних відстаней. Введемо ступінь хімічного ближнього порядку (БП)

$$\aleph = \frac{Z_{\alpha\alpha'} - \langle Z \rangle C_{\alpha'}}{\langle Z \rangle C_{\alpha'}},$$

де $\langle Z \rangle$ – середнє координаційне число, $Z_{\alpha\alpha'}$ – кількість атомів сорту α в оточенні атому сорту α' . Тоді

$$\begin{aligned} Z_{\alpha\alpha'} &= (\aleph + 1) \langle Z \rangle C_{\alpha'} \\ Z_{\alpha'\alpha} &= (\aleph + 1) \langle Z \rangle C_{\alpha} \\ Z_{\alpha\alpha} &= \langle Z \rangle - Z_{\alpha\alpha'} \quad Z_{\alpha'\alpha'} = \langle Z \rangle - Z_{\alpha\alpha'}. \end{aligned} \quad (9)$$

Оскільки

$$U^{\alpha\alpha'}(\bar{R}_n) = \frac{N_L}{2} \left[\sum_{\alpha} Z_{\alpha\alpha} U^{\alpha\alpha} + \sum_{\alpha \neq \alpha'} Z_{\alpha\alpha'} U^{\alpha\alpha'} \right].$$

Вважаючи, що $\langle Z \rangle$ залежить від щільності n лінійно з урахуванням (9), отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial U^{\alpha\alpha'}(\bar{R}_n)}{\partial n} &= \frac{N_L}{2} \left\{ \sum_{\alpha} \left[\xi(1 - (\aleph + 1)C_{\alpha'}) U^{\alpha\alpha'} + \langle Z \rangle (1 - (\aleph + 1)C_{\alpha'}) \frac{\partial U^{\alpha\alpha'}}{\partial n} \right] + \right. \\ &\left. + \sum_{\alpha \neq \alpha'} \left[\xi(\aleph + 1)C_{\alpha'} U^{\alpha\alpha'} + \langle Z \rangle (\aleph + 1)C_{\alpha'} \frac{\partial U^{\alpha\alpha'}}{\partial n} \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}(\bar{R}_n)}{\partial n^2} &= \frac{N_L}{2} \left\{ \sum_{\alpha} \left[\xi(1 - (\aleph + 1)C_{\alpha'}) \frac{\partial U^{\alpha\alpha'}}{\partial n} + \langle Z \rangle (1 - (\aleph + 1)C_{\alpha'}) \frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}}{\partial n^2} \right] + \right. \\ &\left. + \sum_{\alpha \neq \alpha'} \left[\xi(\aleph + 1)C_{\alpha'} \frac{\partial U^{\alpha\alpha'}}{\partial n} + \langle Z \rangle (\aleph + 1)C_{\alpha'} \frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}}{\partial n^2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (10)$$

де $\xi = \frac{\partial \langle Z \rangle}{\partial n}$ і вважається, що \aleph не залежить від n

та $C_{\alpha'}$. Аналогічні вирази можуть бути отримані для $\frac{\partial U^{\alpha\alpha'}(\bar{R}_n)}{\partial C_{\alpha}}$, $\frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}(\bar{R}_n)}{\partial C_{\alpha} \partial n}$, $\frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}(\bar{R}_n)}{\partial C_{\alpha} \partial C_{\alpha'}}$.

Оскільки похідні $\frac{\partial U}{\partial n}$ і $\frac{\partial^2 U}{\partial n^2}$ пов'язані зі зміною середніх міжатомних відстаней $\langle r_{at} \rangle$, запишемо

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial n} &= -\frac{1}{3} \left(\frac{\langle r_{at} \rangle V_{at}}{k} \right) \frac{\partial U}{\partial r}, \\ \frac{\partial^2 U}{\partial n^2} &= \frac{1}{9} \left(\frac{\langle r_{at} \rangle^2 V_{at}^2}{k^2} \right) \frac{\partial^2 U}{\partial r^2}, \end{aligned} \quad (11)$$

де k – коефіцієнт пакування.

Похідна $\left(-\frac{\partial U}{\partial r} \right)$ визначає сили, спричинені

деформацією потенційних функцій оточення кожного атома. Середню величину цих сил, що припадає на атом, можна знайти, розділивши макроскопічну деформацію, обумовлену різницею коефіцієнтів термічного розширення зовнішньої та внутрішньої областей $\Delta\beta_{12}$ і концентрації дефектів у них на кількість атомів, що знаходяться на поверхні S_L

$$\langle \bar{F}_{iat}^L \rangle = \left[G \Delta\beta_{12} \Delta T V + \sum_j C_{def}(\bar{r}_j) a_{def}(\bar{r} - \bar{r}_j) \right] \frac{V_{at}}{S_L \Delta h}, \quad (12)$$

де $C_{def}(\bar{r}_j)$ – концентрація дефектів, G – модуль стиску, $\Delta T = T_g - T$, V – об'єм неоднорідності; $a_{def}(\bar{r} - \bar{r}_j)$ – описує силу, що діє в околиці точки \bar{r} , викликану дефектом, розташованим у точці \bar{r}_j .

Розкладаючи суму по j в інтеграл Фур'є та з огляду на те, що об'єм V структурної неоднорідності багато більше об'єму граничної області, знайдемо

$$\langle \bar{F}_{iat}^L \rangle = \left[G \Delta\beta_{12} \Delta T V + V \Delta C_0^{1,2} a_0 \right] \frac{V_{at}}{S_L \Delta h}, \quad (13)$$

де $\Delta C_0^{1,2} = \langle C \rangle \exp\left(\frac{E_1}{kT_{f1}} - \frac{E_2}{kT_{f2}} \right)$, а $\langle C \rangle$ – середня концентрація дефектів у матеріалі, S_L – площа поверхні.

Звідки

$$\frac{\partial U}{\partial n} = -\frac{1}{3} \frac{\langle r_{at} \rangle V_{at}^2}{k S_L \Delta h} \sum_i \left[G \Delta\beta_{12} \Delta T V + V \Delta C_0^{1,2} a_0 \right]. \quad (14)$$

У наближенні незмінної площі S_L та вважаючи, що зміни у граничній області відбуваються уздовж нормалі \bar{h} , можна скористатися виразом для модуля пружності [12,13]

$$Y_0 = \frac{1}{2} \langle Z \rangle U^{11} \langle r_{at} \rangle S_0^{-1}, \quad (15)$$

де $S_0 = \frac{n}{\langle r_{at} \rangle}$ – площа грані комірки Вігнера-Зейтца,

n – щільність частинок.

Звідки

$$\frac{\partial^2 U}{\partial n^2} = \frac{2}{9} \frac{V_{at}^2}{\langle Z \rangle k^2} \frac{Y_0}{n} = \frac{2}{9} \frac{V_{at}^3}{k^3} Y_0. \quad (16)$$

Похідні виду $\frac{\partial U}{\partial C_{\alpha}}$ пов'язані з різницею розмірів

атомів. Якщо $\Delta r_{\alpha\alpha'} = r_{\alpha} - r_{\alpha'} \neq 0$, то заміна атома α на α' призводить до локального стиску (розтягу) в області БП, а отже, і до зміни $U(r)$. Покладаючи $r = r_0(1 + mC_{\alpha})$, запишемо $\frac{\partial U}{\partial C} = \frac{\partial U}{\partial r} m r_0$ ($m = 1, 2, 3$).

Оцінка похідної $\frac{\partial U}{\partial r}$ здійснюється у послідовності

аналогічно до тієї, яка призвела до формули (14), лише замість величини $\Delta\beta_{12}\Delta TV$ використано $3Vm\Delta C_\alpha$.

Тоді

$$\frac{\partial U}{\partial C_\alpha} = 3Gm^2V \Delta C_\alpha \frac{\langle r_{at} \rangle V_{at}^2}{\Delta S_L \Delta h}, \quad (17)$$

де ΔC_α – флуктуація концентрації атомів сорту α в об'ємі V .

Для другої похідної $\frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}}{\partial C_\alpha \partial n}$ отримаємо

$$\frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}}{\partial C_\alpha \partial n} = -\frac{2}{3} \frac{m^2 V \Delta C_\alpha}{\langle Z \rangle k} V_{at}^2 Y_0, \quad (18)$$

Скориставшись попередніми оцінками та покладаючи $r_0 = \langle r_{at} \rangle (1 + mC^2)$, знайдено

$$\frac{\partial^2 U^{\alpha\alpha'}}{\partial C_\alpha \partial C_{\alpha'}} = \frac{2m(1 + C_{\alpha'})}{\langle Z \rangle m} Y_0 + 3m^2 \frac{G\Delta C_\alpha V}{S_L \Delta h} \langle r_{at} \rangle V_{at}. \quad (19)$$

З рівняння (19) випливає, що поправка до енергії, що обумовлена границями областей, визначається пружними константами матеріалу, розміром та формою неоднорідностей, характером зміни концентрації та щільності частинок n уздовж нормалі до границі.

Підставляючи вирази (16) - (19) у формулу (12) остаточно отримуємо [5,6]:

$$\Delta H = \frac{2}{9} \frac{V_{at}^3 Y_0 \langle \rho^2 \rangle}{k^3} - \frac{4}{3} \sum_{\alpha} \frac{m\Delta C_\alpha V_{at}^3}{\langle Z \rangle k} \frac{Y_0 \langle \Delta C_\alpha \Delta \rho \rangle}{k} + \sum_{\alpha, \alpha'} \left[\frac{m(1 + qC_{\alpha'}) Y_0}{\langle Z \rangle k} + \frac{3mG\Delta C_\alpha \langle r_{at} \rangle V_{at}}{S_L h \langle \Delta C_\alpha \Delta C_{\alpha'} \rangle} \right] \quad (20)$$

де Y_0 – модуль пружності; V_{at} – об'єм, що припадає на атом; k – середній коефіцієнт пакування; $\langle Z \rangle$ – середнє координаційне число; G – модуль стиску; S_L – площа поверхні поділу неоднорідність-матриця; $\langle r_{at} \rangle$ – середня міжатомна відстань; $\langle \Delta \rho^2 \rangle$, $\langle \Delta C_\alpha \Delta C_{\alpha'} \rangle$, $\langle \Delta \rho \Delta C_\alpha \rangle$ – відповідно, середньоквадратичні флуктуації густини, концентрації та кореляційної поправки.

Для типових значень пружних модулів [12,16], r_{at} , V_{at} , k та відносної величини флуктуації 1% додаток ΔH до внутрішньої енергії системи становить 10...20 кДж/моль. Величина ΔH залежить від хімічного складу сплавів, розміру та форми (структурних або концентраційних) неоднорідностей, характеру зміни їх концентрації та густини вздовж нормалі до границі поділу неоднорідність-матриця.

Отже, флуктуаційне відхилення міжатомних відстаней, щільності та концентрації характеризують області матеріалу, що володіють підвищеною густиною внутрішньої енергії. Такі флуктуації є джерелом напружень в АС, а дефекти атомного рівня в них можна характеризувати, аналізуючи поле невідповідностей [5]. Зв'язок між напруженнями та невідповідностей у ближньому оточенні атомів описують [16] локальним тензором напружень:

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{2V_i} \sum_{i,j} \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{r_{ij}}, \quad (21)$$

де V_0 – об'єм розглянутої області навколо атома i , $U(r_{i,j})$ – потенційна енергія взаємодії атомів на відстані $r_{i,j}$. У даному підході завдання оцінки напружень зводиться до введення невідповідностей у матеріал і до розрахунку поля тензора деформації ε_{ij} , отриманого з експериментів в результаті дослідження релаксації поля невідповідностей [15].

Наявність локальних відмінностей градієнтів температури та зсувних напружень, що виникають у процесі формування аморфних сплавів методом швидкого гартування з розплаву, потребує розгляду напружень двох типів. Напруження $\hat{\sigma}_1(\vec{r})$ поширюються по всьому об'єму аморфного матеріалу й залежать від технологічних умов його отримання. Напруження $\hat{\sigma}_2(\vec{r})$ мають флуктуаційний характер, визначаються відмінностями процесів структуроутворення в різних мікрооб'ємах аморфного матеріалу та залежать від сил міжатомної взаємодії та умов формування. Поле тензора напружень, що діють у матеріалі, становить суму $\hat{\sigma}(r) = \hat{\sigma}_1(\vec{r}) + \hat{\sigma}_2(\vec{r})$.

Якщо в експерименті спостерігається значний об'єм V матеріалу, то $\langle \hat{\sigma}_2(\vec{r}) \rangle_V = 0$. Завдання визначення напружень $\hat{\sigma}_2(\vec{r})$ може бути зведене до виміру відмінностей деформацій в різних мікрооб'ємах від середніх значень $\langle \hat{\varepsilon}(r) \rangle_V$. В разі швидкого гартування розплаву флуктуації тензора $\hat{\varepsilon}(r)$ виникають внаслідок неоднорідності в'язкої течії, яке майже не залежить від шарової частини тензора напружень. Частину тензора $\hat{\sigma}_2(\vec{r})$, зумовлену технологією гартування, внаслідок напрямленого тепловідводу, можна вважати двовимірною [3,5]. У цьому наближенні вважається, що існує лише локальний чистий плаский зсув, який характеризується еліпсом деформації. Оскільки деформаційне поле є неоднорідним, то слід розглядати певний набір характеристичних еліпсів, форма та орієнтація яких залежать від \vec{R} . Це дає змогу проводити оцінки напружень та їх зміни під впливом зовнішніх чинників за електронно-мікроскопічними дослідженнями при застосуванні фур'є когерентної спектроскопії [5,6].

Висновки

В аморфних сплавах, отриманих швидким гартуванням з розплаву, величини пружної енергії матриці $U^{\alpha\beta}(R)$ та енергії поверхневого натягу структурної неоднорідності ΔH близькі за значеннями та залежно від складу, режимів одержання становлять 5...20 кДж/моль. Дефекти будови, характер зміни пружної енергії та поля напружень у значній мірі визначають кінетику та

механізм структурної релаксації та кристалізації аморфних сплавів.

Барабаш М.Ю. – канд. техн. наук, старший науковий співробітник;
Куницька Л.Ю. – молодший науковий співробітник;
Куницький Ю.А. – докт. фіз.-мат. наук, проф., завідувач відділу.

- [1] *Металлические стекла* / Под ред., Г. Бека и В. Гюнтероде. Вып.2, М., Мир. 456 с. (1986).
- [2] *Быстрозакаленные металлические сплавы* / Под ред. С. Штиба и Г. Варлимонга М., Metallurgia, 376 с. (1989).
- [3] А.П. Шпак, Ю.А. Куницький, В.И. Лысов. *Кластерные и наноструктурные материалы*. Т. 2. – Киев: Академперіодика, 540 с. (2002).
- [4] Ю.А. Куницький, В.Н. Коржик, Ю.С. Борисов. *Некристаллические металлические материалы и покрытия в технике*. Киев, Техника, 199 с. (1988).
- [5] Ю.А. Куницький, Я.Л. Купина, В.М. Коржик. *Структурні особливості аморфних плівок*. Київ, Либідь. 80 с. (1998).
- [6] Ю.А. Куницький, Я.Л. Купина. *Електронна мікроскопія*. Київ, Либідь. 592 с. (1998).
- [7] А.С. Бакай. *Поликластерные аморфные тела*. М., 192 с. (1987).
- [8] З.А. Самойленко. *Кластерообразование в структурах с нарушенным дальним порядком*. Киев, Вища школа, 129 с. (1997).
- [9] А.П. Шпак, П.Г. Черемской, Ю.А. Куницький, О.В. Соболев. *Кластерные и наноструктурные материалы*. Том 3. К., Академперіодика, 520 с. (2005).
- [10] М.А. Леонтович. *Введение в термодинамику. Статистическая физика*. М., Наука, 416 с. (1983).
- [11] А.И. Ахиезер. К теории металлических стекол // *Металлофизика*, (5), сс. 3-7 (1984).
- [12] И.В. Золотухин. *Физические свойства аморфных металлических материалов*. М., Metallurgia, 176 с. (1986).
- [13] В.П. Алехин, В.А. Хоник. *Структура и физические закономерности деформации аморфных сплавов*. М., Metallurgia, 248 с. (1992).
- [14] V. Vitek, T. Egami. Atomic level stresses in solids and liquids // *Phys. St. Sol.*, B144. pp. 142-156 (1987).
- [15] R. Pawellek, M. Fahnle. Continuum theory of internal stress in amorphous metals // *J. Phys. Condens. Matter*. 1, N40, p.7257-7266 (1989).
- [16] R.C. Handley. Magnetic relaxation and structural transformations in metallic glasses // *Phys. Rev.*, B24, N10. pp. 4980-4991 (1981).

М.Ю. Barabash¹, Л.Ю. Kunitska², Ю.А. Kunitskiy¹

Physical model of strain rate in amorphous alloys

¹Technical Center of NAN of Ukraine,
13, Pokrovska Str, Kyiv, 04070, Ukraine
38(044) 4242348, nanosys@imp.kiev.ua

²Chemical Surface Institute named O.O. Chuyko NAN of Ukraine,
17, General Naumov Str, Kyiv, 03164, Ukraine nanosys@imp.kiev.ua

Defects of atomic and local level of structure are considered. It is noted that the heterogeneities of local level is inalienable part of amorphous structure. Defects of microscopic, macroscopic level and heterogeneities which introduced by hardening technology are considered in this work. It is determined that there exist connection between the stresses and structure heterogeneities.