

ФИЗИКА

УДК 548.0

М. Н. ВЕРЕЩАГИН, О. М. ОСТРИКОВ

КВАДРИУПОЛЬНО-ДИСКЛИНАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ
АМОРФНОГО МАТЕРИАЛА

(Представлено академиком А. В. Степаненко)

Гомельский государственный технический университет

Поступило 09.04.2004

Введение. В настоящее время активно разрабатываются атомные модели структуры аморфного состояния вещества [1]. Данные модели позволяют рассчитывать структурный фактор и ближний порядок в неупорядоченных аморфных средах. На более высоком уровне абстрагирования в плане рассмотрения структуры конденсированных систем, не имеющих дальнего порядка, находятся дислокационные и дисклинационные модели [1]. Данные модели не позволяют точно определять расположение атомов в аморфном твердом теле, но они дают возможность рассмотреть коллективную миграцию атомов и места их локализации в виде фазовых выделений.

Целесообразность дислокационных и дисклинационных моделей заключается в том, что беспорядок в упорядоченной системе можно воссоздать путем введения в нее определенного количества дефектов, достаточного, чтобы порядок можно было бы считать беспорядком. В отличие от разрабатываемых в настоящее время дисклинационных моделей, в которых используется совокупность единичных хаотично распределенных в среде дисклинаций, в данной работе предлагается использование дисклинационных квадриуполей, что позволяет упростить математические расчеты, способствуя уменьшению машинного времени для выполнения компьютерных расчетов.

Постановка задачи. Поля напряжений у дисклинационного квадриуполя, представленного на рис. 1, описываются известными соотношениями [2]. Применяя принцип суперпозиции [3, 4], для хаотически распределенных в заданной области дисклинационных квадриуполей имеем

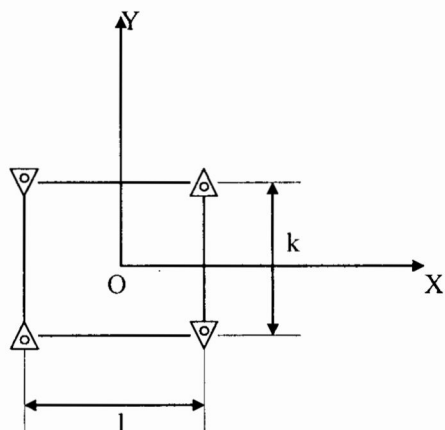


Рис. 1. Дисклинационный квадриуполь [2]

$$\sigma_{xx} = \frac{\mu\omega}{2\pi(1-\nu)} \sum_i \left[\left\{ \frac{(y-h_i+k/2)^2}{(y-h_i+k/2)^2+(x-d_i+l/2)^2} - \frac{(y-h_i-k/2)^2}{(y-h_i-k/2)^2+(x-d_i+l/2)^2} - \frac{(y-h_i+k/2)^2}{(y-h_i+k/2)^2+(x-d_i-l/2)^2} + \frac{(y-h_i-k/2)^2}{(y-h_i-k/2)^2+(x-d_i-l/2)^2} - \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(y-h_i+k/2)^2+(x-d_i-l/2)^2}{(y-h_i+k/2)^2+(x-d_i+l/2)^2} \cdot \frac{(y-h_i-k/2)^2+(x-d_i+l/2)^2}{(y-h_i-k/2)^2+(x-d_i-l/2)^2} \right] \right\} \right];$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu\omega}{2\pi(1-\nu)} \sum_i \left[\left\{ \frac{(x-d_i+l/2)^2}{(y-h_i+k/2)^2+(x-d_i+l/2)^2} - \frac{(x-d_i+l/2)^2}{(y-h_i-k/2)^2+(x-d_i+l/2)^2} - \frac{(x-d_i-l/2)^2}{(y-h_i+k/2)^2+(x-d_i-l/2)^2} + \frac{(x-d_i-l/2)^2}{(y-h_i-k/2)^2+(x-d_i-l/2)^2} - \frac{1}{2} \ln \left[\frac{(y-h_i+k/2)^2+(x-d_i-l/2)^2}{(y-h_i+k/2)^2+(x-d_i+l/2)^2} \cdot \frac{(y-h_i-k/2)^2+(x-d_i+l/2)^2}{(y-h_i-k/2)^2+(x-d_i-l/2)^2} \right] \right\} \right]; \tag{1}$$

$$\sigma_{zz} = \frac{\mu\omega\nu}{2\pi(1-\nu)} \times \sum_i \ln \left[\frac{(y-h_i+k/2)^2 + (x-d_i+l/2)^2}{(y-h_i+k/2)^2 + (x-d_i-l/2)^2} \cdot \frac{(y-h_i-k/2)^2 + (x-d_i-l/2)^2}{(y-h_i-k/2)^2 + (x-d_i+l/2)^2} \right];$$

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu\omega}{2\pi(1-\nu)} \sum_i \left[\left[\frac{(y-h_i+k/2)(x-d_i+l/2)}{(y-h_i+k/2)^2 + (x-d_i+l/2)^2} - \frac{(y-h_i-k/2)(x-d_i+l/2)}{(y-h_i-k/2)^2 + (x-d_i+l/2)^2} - \frac{(y-h_i+k/2)(x-d_i-l/2)}{(y-h_i+k/2)^2 + (x-d_i-l/2)^2} + \frac{(y-h_i-k/2)(x-d_i-l/2)}{(y-h_i-k/2)^2 + (x-d_i-l/2)^2} \right] \right],$$

где ω — модуль вектора поворота Вольтерра; k и l — параметры дисклинационного квадриуполя (рис. 1); где i — индекс суммирования; d_i и h_i — параметры, определяющие расположение центров квадриуполей. Данные параметры задавались с помощью генератора случайных чисел таким образом, чтобы распределение квадриуполей было равномерным.

Результаты и их обсуждение. Результаты расчетов напряжений представлены на рис. 2, а–г. Следует отметить, что рассчитывались приведенные напряжения $\sigma_{xx}^* = \sigma_{xx}/A$, $\sigma_{yy}^* = \sigma_{yy}/A$, $\sigma_{zz}^* = \sigma_{zz}/B$ и $\sigma_{xy}^* = \sigma_{xy}/A$ ($A = \frac{\mu\omega}{2\pi(1-\nu)}$, $B = \frac{\mu\omega\nu}{2\pi(1-\nu)}$). Для расчетов принималось $k=l=1$ мкм, плотность квадриуполей бралась равной 10 мкм^{-2} .

Из рис. 2 видно, что напряжения в аморфном материале распределены не равномерно, а локализуются в определенных областях. Напряжения σ_{xx}^* и σ_{yy}^* одного знака во всем мате-

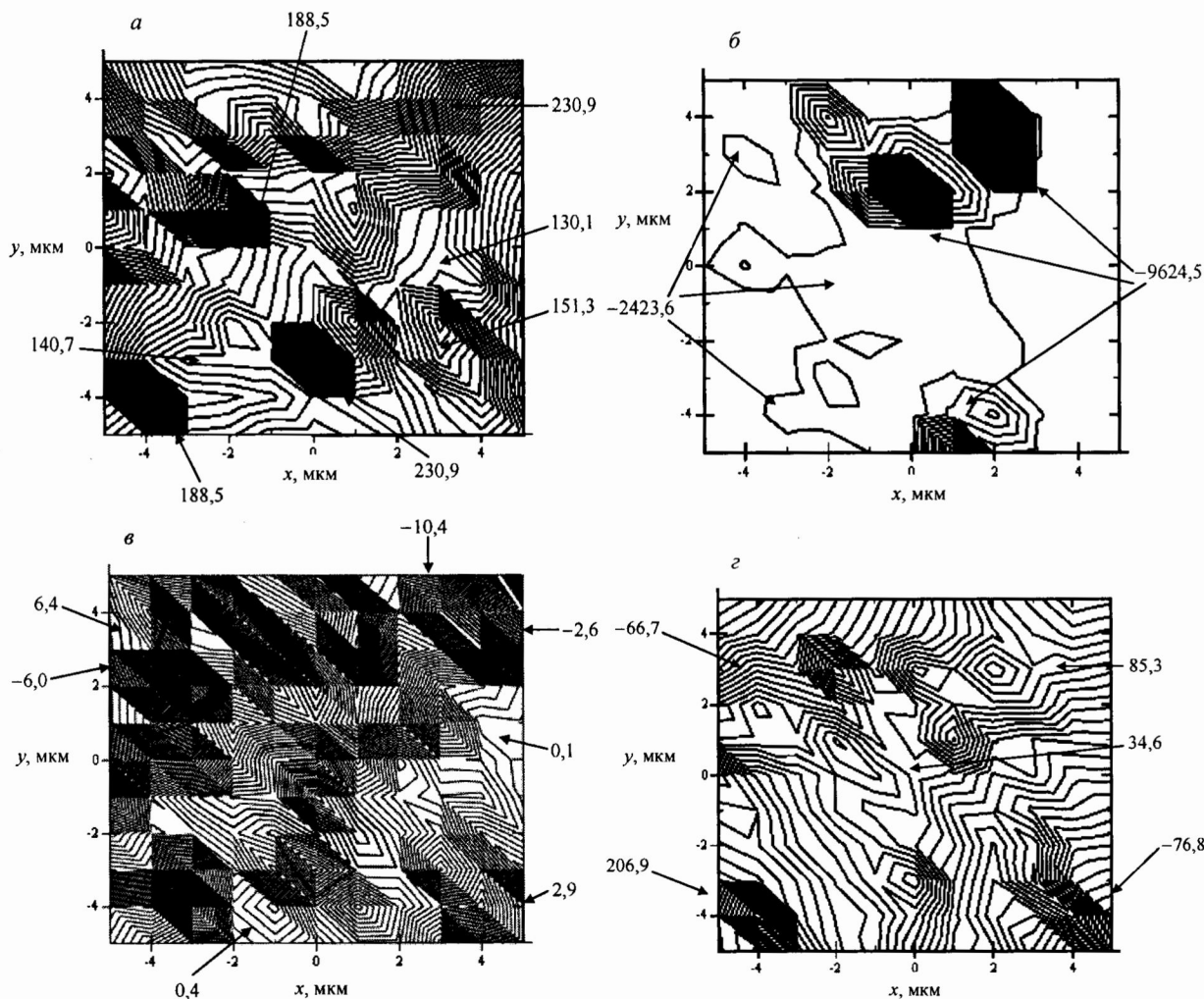


Рис. 2. Распределение нормальных σ_{xx}^* (а), σ_{yy}^* (б), σ_{zz}^* (в) и тангенциальной σ_{xy}^* (г) составляющих тензора напряжений в матрице аморфного материала

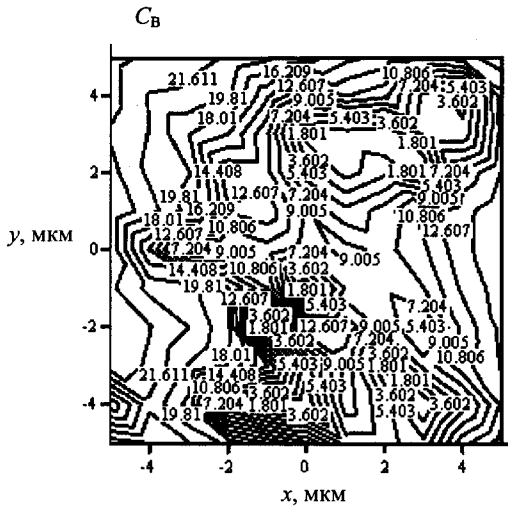


Рис. 3. Распределение бора в аморфном сплаве $Fe_{75}V_{25}$.

риале, а напряжения σ_{xx}^* и σ_{yy}^* знакопеременны. Результаты существенно зависят от параметров квадриполей (k и l), при $k = l$ области локализации напряжений имеют форму, близкую к форме окружности (рис. 2). При $k \neq l$ форма данных областей приобретает вид эллипсов, вытянутых в сторону большего параметра квадриполя.

Следует отметить, что определение напряжений в аморфных материалах, обусловленных неупорядоченностью их структуры, является актуальной современной проблемой [1]. Дисклинационная модель дает возможность решить эту проблему. Более того, данная модель позволяет производить расчеты распределения легирующего компонента в матрице аморфного материала.

На рис. 3 приведен результат расчета распределения бора в сплаве $Fe_{75}V_{25}$. При этом использовались следующие данные: $r_{Fe} = 1,27 \text{ \AA}$, $r_B = 0,97 \text{ \AA}$ [4]. Расчетная формула имеет вид

$$C = C_B \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \quad (2)$$

где C_B — концентрация бора вдали от внутренних источников напряжений; k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура. Энергия U определяется по формуле

$$U = -\frac{4}{3} \pi r_{Fe}^3 \varepsilon (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}), \quad (3)$$

где $\varepsilon = (r_B - r_{Fe})/r_{Fe}$ — малый параметр.

Как видно из рис. 3, примеси в аморфном материале распределены не равномерно, а локализованы в определенных областях.

Таким образом, предложена квадрипольно-дисклинационная модель аморфного состояния. На основании данной модели рассчитаны поля напряжений и распределение примеси в матрице металлического стекла.

Литература

1. Глезер А. М., Молотилев Б. В. Структура и механические свойства аморфных сплавов. М., 1992.
2. Лихачев В. А., Хайров Р. Ю. Введение в теорию дисклиний. Л., 1975.
3. Верещагин М. Н., Остриков О. М., Зюков Д. Б. // Докл. НАН Беларуси. 2003. Т. 47, № 3. С. 117–120.
4. Верещагин М. Н., Остриков О. М. // Прикладная механика и техническая физика. 2003. Т. 44, № 3. С. 164–168.

VERESHCHAGIN M. N., OSTRIKOV O. M.

QUADRUPOLE DISCLINATION MODEL OF AMORPHOUS MATERIAL

Summary

A quadrupole discline model of amorphous material is developed. Stress field and admixture distributions in metal a glass are calculated.