Наука и Образование
МГТУ им. Н.Э. Баумана
Сетевое научное издание
ISSN 1994-0408

Наука и Образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана.
Электрон. журн. 2016. № 03. С. 221–231.

DOI: **10.7463/0316.0835308**

Представлена в редакцию: 02.02.2016
Исправлена: 16.02.2016

УДК 531.21

Моделирование релаксационных процессов в металлических стеклах с применением механихеской модели

Саркисов В.Ш.[1], Тер-Микаэлян П.Ю.[2,*], Москин И.В.[3]

[*] gbtermik@yandex.ru

[1]Московский государственный университет дизайна и технологии, Москва, Россия
[2]ООО «НПТ Климатика», Москва, Россия
[3]Подольский филиал, Московский финансово-промышленный университет «Синергия», Подольск, Россия

Рассмотрена возможность моделирования релаксационных процессов в металлических стеклах с применением механической модели Максвелла, учитывающей наличие упругой и пластической деформации при растяжении твердого тела. Для решения поставленной задачи в математическое описание двухэлементной механической модели введена зависимость коэффициента вязкости от времени, энергии активации и температуры. Получены уравнения ползучести и релаксации напряжения для описания релаксационных процессов в металлическом стекле при сравнительно больших временах испытания. Разработана методика определения модуля упругости и параметров входящих в зависимость коэффициента вязкости по теоретическим и экспериментальным кривым ползучести. Показана возможность моделирования релаксационных процессов в металлическом стекле на примере $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$ с применением механической модели.

Ключевые слова: ползучесть, релаксация напряжения, механическая модель, металлическое стекло

1. Введение

Для аналитического описания нелинейной вязкоупругости полимерных волокон и нитей с использованием трехэлементной механической модели, учитывающей наличие упругой и высокоэластической деформации, в математическое описание модели были введены зависимости коэффициента вязкости от напряжения и времени [1,2]. Введение перечисленных зависимостей позволило адекватно описать нелинейную вязкоупругость волокон и нитей и осуществить прогноз деформационных свойств волокон и нитей, проявляемых при различных режимах нагружения по диаграммам ползучести или по диаграммам релаксации напряжения.

Металлические стекла (МС) при их растяжении характеризуются наличием упругой и пластической деформацией [3], в то время как при нагружении синтетических нитей в суммарную деформацию полимерной нити входит высокоэластическая деформация, присущая только полимерам. Тем не менее, представляет научный интерес рассмотрение задачи моделирования релаксационных процессов в МС при их нагружении с позиции описания нелинейной вязкоупругости нитей, изложенной в работах [1,2].

Механическая модель Максвелла [4, С.339], учитывает наличие упругой и пластической деформации при нагружении тела. Очевидно, что применение классического аналитического описания модели Максвелла для корректного математического моделирования релаксационных процессов в МС без введения дополнительных зависимостей для коэффициента вязкости при постоянстве модуля упругости в процессе деформации МС не представляется возможным. К такому выводу также, можно прийти, проанализировав результаты работы [5], связанные с изучением ползучести МС. В ней показано, что сдвиговая вязкость МС $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$ линейно возрастает с увеличением времени изотермического испытания на ползучесть. Необходимо отметить, что для определения зависимости сдвиговой вязкости от времени применялась зависимость $\eta = \sigma / 3\dot{\varepsilon}$, где σ - напряжение, $\dot{\varepsilon}$ - скорость деформации, что в принципе отличается от методов определения коэффициента вязкости приведенных в работах [1,2].

Целью работы является исследование возможности применения модели Максвелла для описания релаксационных процессов в МС.

2. Уравнения модели

Для описания релаксации напряжения в МС запишем дифференциальное уравнение модели Максвелла с учетом зависимости коэффициента вязкости от времени, температуры и энергии активации, зависящей от напряжения:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{E}\frac{d\sigma}{dt} + \frac{\sigma}{\eta(\cdot,t)}, \qquad (1)$$

где σ - напряжение, ε - деформация, E - модуль упругости, $\eta(\cdot,t) = \eta[t, \Delta U(\sigma), T]$ коэффициент вязкости, зависящий от текущего времени t, энергии активации $\Delta U(\sigma)$ и температуры T.

Из (1) при $\varepsilon = const$ и $T = const$ с учетом положения о независимости энергии активации $\Delta U(\sigma)$ от режимов испытания для достижения наперед заданного напряжения σ после интегрирования и проведения преобразований, имеем

$$\sigma(t) = \sigma_0 \exp\left(-\int_0^t \frac{E}{\eta(\cdot,t)} dt \right), \qquad (2)$$

где σ_0 - напряжение при $t = 0$.

В работе [3] приведены результаты исследования релаксации напряжения в массивном металлическом стекле $Zr_{52.5}Ti_5Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10}$. В ней, на основе обработки экспериментальных данных показано, что во временном интервале $400-10000$ *с.* логарифм напряжения линейно уменьшается с возрастанием логарифма времени. Поэтому, для нахождения зависимости коэффициента вязкости от времени, допустим, что процесс релаксации напряжения в МС описывается уравнением

$$\sigma = \sigma_0 (1+\beta t)^{-\frac{1}{k\beta}} , \tag{3}$$

где $k = k(\sigma, T) = A \exp \frac{\Delta U(\sigma)}{KT}$, $\Delta U(\sigma) = U_0 - \alpha\sigma$ - энергия активации, U_0- энергия при $\sigma = 0$, α - активационный объём, A - предэкспоненциальный множитель, K - постоянная Больцмана, β - параметр.

Необходимо отметить, что уравнение (3) получено при условии, что энергия активации $\Delta U(\sigma)$ не зависит от режимов достижения наперед заданного напряжения. Поэтому, при применении уравнения (3) для описания релаксации напряжения в материале сначала рассчитывается время при известных значениях σ_0, σ, β и k, после чего, строится кривая релаксации напряжения. Нетрудно убедиться, что при $\beta t >> 1$, уравнение (3) приводится к уравнению $\sigma = \sigma_0 (\beta t)^{-\frac{1}{k\beta}}$, из которого следует линейная зависимость $\ln\sigma$ от $\ln t$ при условии $k\beta = const.$ Из уравнений (2) и (3) выводится зависимость коэффициента вязкости от времени:

$$\eta(\sigma, T, t) = E(1+\beta t) A \exp \frac{\Delta U(\sigma)}{KT} \tag{4}$$

Очевидно, что после подстановки (4) в уравнение (2) и последующего интегрирования получим уравнение (3).

После нахождения зависимости коэффициента вязкости от времени, в рассматриваемом случае зависимость (4), и подстановки в дифференциальное уравнение модели (1) получим дифференциальное уравнение для описания упругих и пластических свойств исследуемого объекта, проявляемых при различных режимах испытаний:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{E}\frac{d\sigma}{dt} + \frac{\sigma}{E}\left[(1+\beta t) A \exp \frac{\Delta U(\sigma)}{KT}\right]^{-1}. \tag{5}$$

Решая дифференциальное уравнение модели (5) относительно ε при условиях $E = const, \sigma = const$, $\beta = const$ и $T = const$, получим уравнение модели для описания ползучести исследуемого объекта в изотермических условиях:

$$\varepsilon = \varepsilon_y + \frac{\sigma}{Ek\beta}\ln(1+\beta t), \tag{6}$$

где $\varepsilon_y = \frac{\sigma}{E}$ - упругая деформация.

3. Методика определения параметров модели по кривым ползучести и обсуждение результатов

Для иллюстрации возможности применения уравнений (3) и (6) к описанию релаксационных процессов в МС воспользуемся результатами работ [5,6].

В работе [5] посвященной изучению кинетики изотермической ползучести МС $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$ с учетом статистического распределения активационных параметров, показано, что при больших временах испытания ($t > 10^3 - 10^4 c.$) МС на ползучесть в изотермических условиях, зависимости ε - $\ln t$ для материалов с различной предысторией (различные времена отжига до испытания) линейны. Аналогичная зависимость следует из уравнения (6). При $\beta t >> 1$ и $\frac{1}{k\beta}\ln\beta t >> 1$ уравнение (6) приводится к виду

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{Ek\beta}\ln\beta t\,.$$

Для определения $k = A\exp\frac{\Delta U(\sigma)}{KT}$, β, A и $\Delta U(\sigma)$, входящих в уравнение (6), использовали приближение $k\beta \approx 1$ и условие, что найденные численные значения $\Delta U(\sigma)$ согласно работе [6] должны принадлежать интервалу $1{,}7 - 2{,}2\ eV$ при значении $A = 10^{-13} c.$

Условие $k\beta = 1$ следует из анализа кривых релаксации напряжения, приведенных в работе [3], в которой показано, что для МС $Zr_{52.5}Ti_5Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10}$ угол наклона прямых в координатах $\ln\sigma - \ln t$ при больших временах не зависит от начального напряжения и постоянен для данной температуры. Например, при Т=523К, угол наклона прямых с осью абсцисс в координатах $\ln\sigma - \ln t$ приблизительно равен 135^0.

Из (3) следует, что при $\beta t >> 1$, образование угла наклона прямой с осью абсцисс равного 135^0, в координатах $\ln\sigma$ - $\ln t$, возможно при условии $k\beta = 1$. Отметим, что условие $k\beta = 1$, позволяет вычислить значение параметра β, используя уравнение (3) по кривой релаксации напряжения.

При условии $k\beta = 1, \sigma = const$, $E = const$, $T = const$ из уравнения (6) выводится уравнение для определения β по кривым ползучести:

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}\left[1 + \ln(1 + \beta t_2)\right] = 1 + \ln(1 + \beta t_1), \tag{7}$$

где ε_1 и ε_2 - деформации, определяемые на линейном участке кривой ползучести, построенной в координатах $\varepsilon - \ln t$, t_1 и t_2 - соответствующие им времена.

После определения численного значения β, которое является решением уравнения (7) становится возможным при известном напряжении, вычислить значение модуля упругости E, используя уравнение (6) и энергию активации $\Delta U(\sigma)$ используя уравнение $k\beta = 1$ при значении $A = 10^{-13} c.$

На рис.1 приведены экспериментальные и расчетные кривые ползучести, построенные в координатах $\varepsilon - \ln t$ для образцов МС $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$ с различной предысторией: МС-1 – время предварительного отжига $\tau = 500\ c.$; МС-2 - время предварительного отжига $\tau = 3600\ c.$. Расчетные кривые построены с применением уравнения (6) со следующими значениями E, β, A, $\Delta U(\sigma)$:

МС-1 - $\sigma = 195 МПа$, $\beta = 6 \cdot 10^{-4} c^{-1}.$, $E = 150 ГПа$, $A = 10^{-13} c.$, $\Delta U(\sigma) = 1{,}843\ eV$;

МС-2 - $\sigma = 195 МПа$, $\beta = 1{,}5 \cdot 10^{-4} c^{-1}.$, $E = 153 ГПа$, $A = 10^{-13} c.$, $\Delta U(\sigma) = 1{,}912\ eV$.

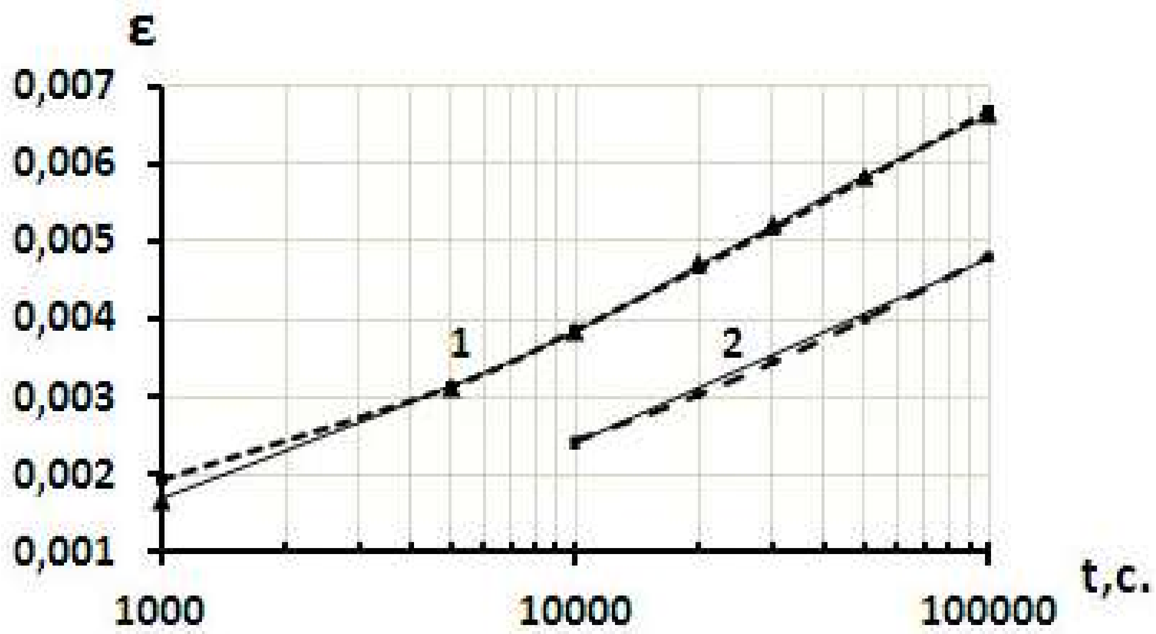

Рис.1. Ползучесть металлического стекла $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$ в изотермических условиях при $T = 573K$, $\sigma = 195 МПа$: 1- МС-1, — - зависимость, приведенная в работе [7]; ---- - расчетная зависимость с применением уравнения (6); 2- МС-2, — - зависимость, приведенная в работе [7]; ---- - расчетная зависимость с применением уравнения (6).

Из рис.1 следует, что расчетная кривая ползучести МС-1 во временном интервале $5000 - 100000\ c.$, практически совпадает с экспериментальной кривой, в то время как для образца МС-2, совпадение наблюдается во временном интервале $10000 - 100000\ c.$ Разность во временном интервале совпадения расчетных и экспериментальных кривых обусловлена различием времен отжига, которые существенным образов влияют на величину параметра β.

В работе [5], при моделировании релаксационных процессов в МС-1 и МС-2 значения активационного объема α равнялись $0{,}09-0{,}12\,\mathrm{nm}^3$. Используя приведенные значения α, произведем оценку величин U_0 для образцов МС-1 и МС-2 с применением следующего равенства: $U_0=\Delta U(\sigma)+\alpha\sigma$. Для МС-1: при $\alpha=0{,}09\,\mathrm{nm}^3$, $U_0=1{,}953eV$; при $\alpha=0{,}12\,\mathrm{nm}^3$, $U_0=1{,}989eV$. Для МС-2: при $\alpha=0{,}09\,\mathrm{nm}^3$, $U_0=2{,}022eV$; при $\alpha=0{,}12\,\mathrm{nm}^3$, $U_0=2{,}058eV$. Заметим, что численное значение U_0 при $T=573\,\mathrm{K}$, приведенное в работе [6] для МС $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$, полученное стандартным методом, сопоставима с расчетными значениями для МС-1 и МС-2.

На рис.2 приведены расчетные зависимости коэффициента вязкости $\eta(\cdot,t)$ от времени для МС-1 при $k\beta=0{,}9950$ и МС-2 при $k\beta=0{,}9997$. Расчеты производились с применением зависимости (4). Приведенные зависимости коэффициента вязкости от времени линейны, что согласуется с результатами работы [5]. К тому же, расчетные значения коэффициента вязкости, полученного для МС-1 сопоставимы с величинами коэффициента вязкости приведенного в работе [5].

Из приведенных графиков на рис.2 следует, что в рассматриваемом временном интервале величины коэффициентов вязкости МС-1 и МС-2 изменяются в процессе деформации на порядок, но при этом разность между ними при фиксированном времени незначительна.

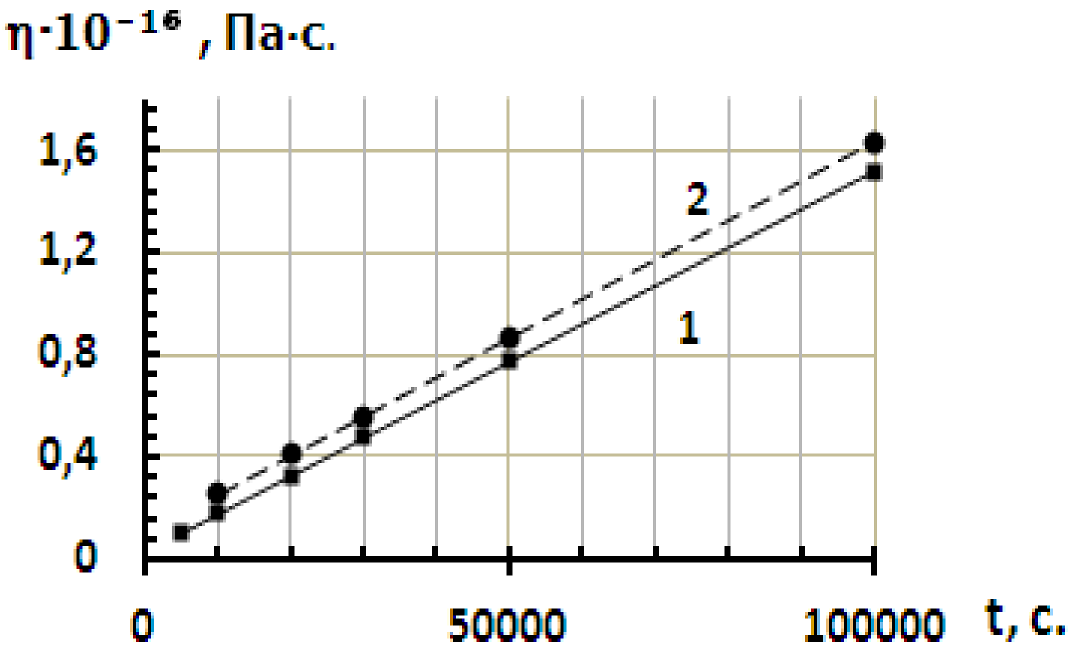

Рис.2. Расчетные зависимости коэффициента вязкости МС $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$ от текущего времени: 1- МС-1, 2-МС-2.

На рис.3 приведены расчетные кривые релаксации напряжения для МС-1 и МС-2, полученные с использованием уравнения (3) и значениями E, β, A, $\Delta U(\sigma)$, определенными по кривым ползучести. Как и следовало ожидать, при достаточно больших временах зависимости $\lg\sigma$ от $\lg t$ для данных стекол линейны и в координатах $\sigma - t$ аппроксимируются функцией $\sigma = C/t$, где C - постоянная, что согласуется с результатами работы [3].

Следует подчеркнуть, что для расширения временного интервала описания и прогнозирования релаксационных процессов в МС протекающих при каком - либо наперед заданном режиме испытания по кривым ползучести или кривым релаксации напряжения с применением механической модели Максвелла необходимо наличие семейства кривых ползучести, полученных при различных напряжениях или семейства кривых релаксации напряжения, характеризующихся различными величинами предварительной деформации. К тому же, при таком подходе, параметр A не задается, а определяется по кривым ползучести, которые получены при равных напряжениях, но при различных температурах.

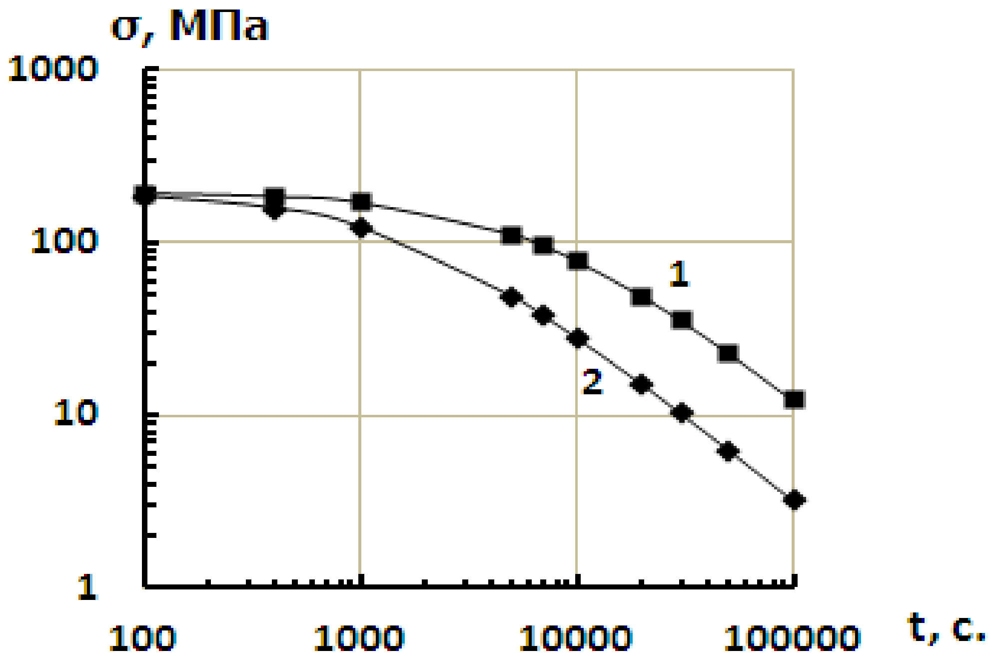

Рис.3. Расчетные кривые релаксации напряжения в МС $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$:

1- МС-2, $\sigma_0 = 195 МПа$, 2- МС-1, $\sigma_0 = 195 МПа$.

4. Заключение

1. В работе получено дифференциальное уравнение для моделирования релаксационных процессов в металлических стеклах при механическом воздействии, учитывающее наличие упругой и пластической деформации.

1.1. Полученное дифференциальное уравнение двухэлементной механической модели включает в себя следующие дополнительные положения относительно дифференциального уравнения модели Максвелла:
   - - положение о независимости энергии активации от режимов деформации при достижении заданного напряжения;
   - - положение о зависимости коэффициента вязкости от текущего времени, энергии активации и температуры.
2. С целью оценки возможности применения полученного дифференциального уравнения для моделирования релаксационных процессов в металлических стеклах при различных режимах их испытаний, разработана методика определения значения модуля упругости и параметров, входящих в полученную зависимость коэффициента вязкости от времени по кривым ползучести.
3. Применимость разработанной методики показана на примере сопоставления экспериментальных кривых ползучести МС $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$ с различной предысторией, полученных при температуре ниже температуры стеклования, с расчетными кривыми ползучести. Показана возможность применения механической модели Максвелла для моделирования долговременных релаксационных процессов в металлических стеклах при условии введения в математическое описание модели дополнительных положений и зависимостей. Дальнейшие исследования будут связаны с моделированием релаксационных процессов в металлических стеклах при их ползучести в неизотермических условиях, с учетом зависимости энергии активации от температуры.

Список литературы

1. Тер-Микаэлян П.Ю., Саркисов А.Ш., Шаблыгин М.В., Саркисов В.Ш. Модель для описания вязкоупругости комплексных нитей с применением гипотезы о подобии изохронных кривых ползучести // Известия вузов. Технология легкой промышленности. 2009. Т. 3, № 1. С. 57-60.
2. Тер-Микаэлян П.Ю., Саркисов А.Ш., Шаблыгин М.В., Тиранов В.Г., Саркисов В.Ш. К описанию релаксации напряжения в нитях из жесткоцепных полимеров // Известия вузов. Технология легкой промышленности. 2011. Т. 13, № 3. С. 44-47.
3. 3. Бобров О.П., Лаптев С.Н., Хоник В.А. Релаксация напряжений в массивном металлическом стекле $Zr_{52.5}Ti_5Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10}$ // Физика твердого тела. 2004. Т. 46, вып. 3. С. 457-460. Режим доступа: http://journals.ioffe.ru/ftt/2004/03/page-457.html.ru (дата обращения 01.02.2016).
4. Малинин Н.Н. Прикладная теория пластичности и ползучести. М.: Машиностроение, 1968. 400 с.
5. Косилов А.Т., Михайлов В.А., Свиридов В.В., Хоник В.А. Кинетика изотермической ползучести металлических стекол с учетом статистического распределения активаци-

онных параметров // Физика твердого тела. 1997. Т. 39, № 11. С. 2008-2015. Режим доступа: http://journals.ioffe.ru/ftt/1997/11/page-2008.html.ru (дата обращения 01.02.2016).

6. Михайлов В.А., Хоник В.А. Кинетика ползучести металлических стекол в условиях линейного нагрева // Физика твердого тела. 1997. Т. 39, № 12. С. 2186-2190. Режим доступа: http://journals.ioffe.ru/ftt/1997/12/page-2186.html.ru (дата обращения 01.02.2016).

Science & Education of the Bauman MSTU
Electronic journal
ISSN 1994-0408

Science and Education of the Bauman MSTU, 2016, no. 03, pp. 221–231.

DOI: **10.7463/0316.0835308**

Received: 02.02.2016
Revised: 16.02.2016

Modeling Relaxation Processes in Metallic Glasses Using the Mechanical Model

V.Sh. Sarkisov[1], P.Yu. Ter-Mikaelyan[2,*], I.V. Moskin[3]

[*] gbtermik@yandex.ru

[1] Moscow State University of Design and Technology, Moscow, Russia
[2] LLC "New Industrial Technologies "Klimatika", Moscow, Russia
[3] Podolsky Branch of Moscow Financial-Industrial University "Synergy", Podolsk, Russia

Keywords: creep, strain relaxation, mechanical model, metallic glasses

Currently, there is a growing interest in finding the patterns of relaxation processes in metallic glasses under mechanical action at temperatures below that of glass-transition, which are a basis for approval of proposed theories to simulate relaxation processes in metallic glasses and implement their proactive behavior under various loading conditions.

It is known that with tensile metallic glasses in creep mode at constant stress under isothermal conditions below the glass-transition temperature and stress in the nondestructive stress action the total strain consists of the elastic strain, immediately growing after the load applied, and the plastic deformation, growing in time. A Maxwell mechanical model takes into account that these two components of strain exist, and it can be used to describe the strain of solids at a qualitative level. The two available components of the total strain of both elastic and plastic form the basis for the proposed theories to describe the relaxation processes in metallic glasses. Therefore, in this paper we consider the possibility to simulate relaxation processes in metallic glasses, including quantitative estimates, using the Maxwell mechanical model.

To solve this problem, in the mathematical description of the two-component mechanical model are introduced a dependence of viscosity on time, stress, activation energy, and temperature, as well as a provision of the activation energy being independent on the deformation modes when reaching the specified stress.

Based on the equations has been developed a technique that uses the experimental creep curves to determine the elastic modulus and the parameters included in the dependence of viscosity. Applicability of the developed technique is demonstrated by comparing the experimental creep curves of metallic glass $Co_{57}Fe_5Ni_{10}Si_{11}B_{17}$ with the calculated creep curves of various histories. Based on the results obtained, the paper comes to conclusion that it is possible to use the Maxwell mechanical model to simulate the long-term relaxation processes in metallic glasses, provided that additional provisions and dependencies are introduced into mathematical description of model.

References

1. Ter-Mikaelyan P.Yu., Sarkisov A.Sh., Shablygin M.V., Sarkisov V.Sh. Model for Describing the Viscoelasticity of Filament Yarns Using the Isochronous Creep Curves Hypothesis. *Izvestiia vysshikh uchebnykh zavedenii. Tekhnologiya legkoi promyshlennosti = Proceedings of Higher Educational Institutions. Technology of Light Industry*, 2009, vol. 3, no. 1, pp. 57-60. (in Russian).
2. Ter-Mikaelyan P.Yu., Sarkisov A.Sh., Shablygin M.V., Tiranov V.G., Sarkisov V.Sh. To the Description of Strain Relaxation in Rigid-Chain Polymer Threads. *Izvestiia vysshikh uchebnykh zavedenii. Tekhnologiya legkoi promyshlennosti = Proceedings of Higher Educational Institutions. Technology of Light Industry*, 2011, vol. 13, no. 3, pp. 44-47. (in Russian).
3. Bobrov O.P., Laptev S.N., Khonik V.A. Stress relaxation in a bulk metallic glass $Zr_{52.5}Ti_5Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10}$. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*, 2004, vol. 46, iss. 3, pp. 457-460. Available at: http://journals.ioffe.ru/ftt/2004/03/page-457.html.ru , accessed 01.02.2016. (in Russian).
4. Malinin N.N. *Prikladnaya teoriya plastichnosti i polzuchesti* [Applied theory of plasticity and creep]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1968. 400 p. (in Russian).
5. Kosilov A.T., Mikhailov V.A., Sviridov V.V., Khonik V.A. The kinetics of isothermal creep of metallic glasses with considering of statistical distribution of activation parameters. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*, 1997, vol. 39, no. 11, pp. 2008-2015. Available at: http://journals.ioffe.ru/ftt/1997/11/page-2008.html.ru , accessed 01.02.2016. (in Russian).
6. Mikhailov V.A., Khonik V.A. Kinetics of creep of metallic glasses in conditions of linear heating. *Fizika tverdogo tela = Solid state physics*, 1997, vol. 39, no. 12, pp. 2186-2190. Available at: http://journals.ioffe.ru/ftt/1997/12/page-2186.html.ru , accessed 01.02.2016. (in Russian).