



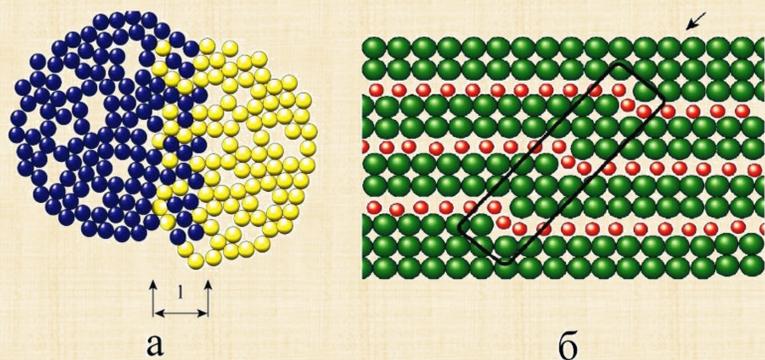
Дендритно-упрочненные аморфные и армированные графеном металлокомпозиаты. Деформационные механизмы и прочностные характеристики.

Полухин В.А.^{1,2} (p.valery47@yandex.ru), Эстемирова С.Х.^{1,2}, Курбанова Э.Д.¹

¹Институт металлургии Уральского отделения РАН, 620016 Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет, 620002 Екатеринбург, Россия

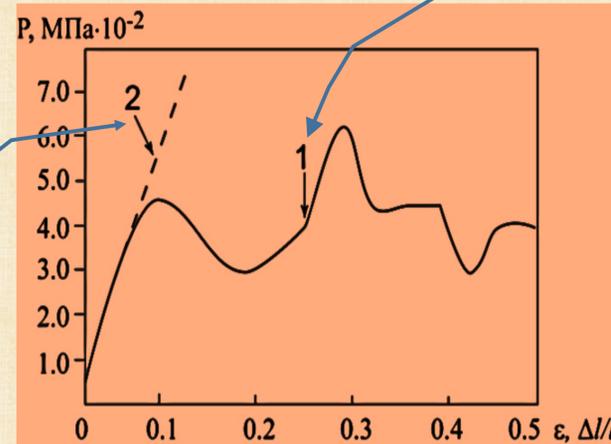
Методом молекулярно-динамического (МД) моделирования изучены деформационные механизмы упрочненных аморфных сплавов и армированных графеном нанослоистых композитов. Установлено (на примере CuZrAl), что в аморфных сплавах под воздействием интенсивных деформаций, сопровождающихся выделением тепла, происходит формирование дендритной нанофазы, которая способствует их упрочнению. Дендритная нанофаза упрочняет сплавы на разрыв до 20 % при нагрузке 2300 Мпа; предел текучести превышает 1550 МПа. В армированных графеном нанослоистых композитах (Me/графен, где Me=Ni, Al, Ti) реализуется деформационный механизм трансферного типа - появление на поверхности образца (по всей его длине) равномерно распределенных микроскопических трещин-углублений («трансфера деформаций»). В композитах, подвергшихся такой деформации, существенно повышаются прочностные характеристики. Результаты моделирования показывают хорошее согласие (10-15%) с литературными экспериментальными данными.



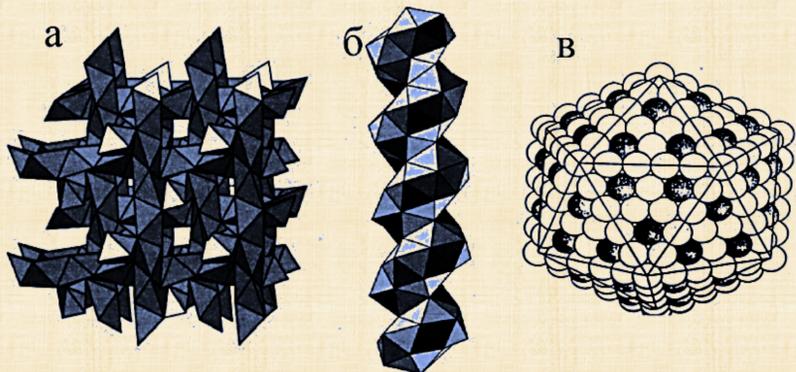
Схемы релаксации STZ - зональных сдвиговых нагрузок трансформации и уплотнения для дендритно-упрочненных аморфных (а) и армированных графеном металлокомпозиатов (б): стрелками указаны полосы зональных сдвигов, вызванных нагрузками

деформационное изменение для стекла $Zr_{41.2}Ti_{13.8}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22}$

Деформационные изменения для аморфного сплава $Zr_{41.2}Ti_{13.8}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22}$, армированного слоями графена (результаты моделирования)

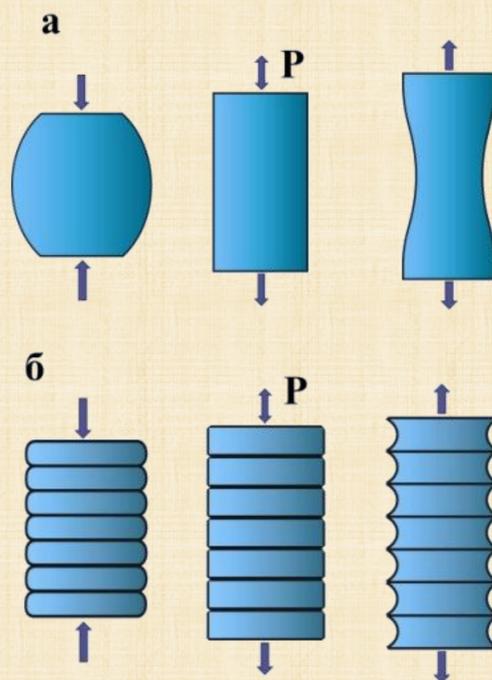
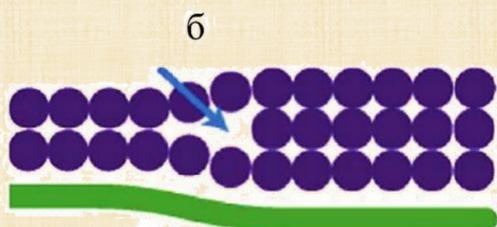
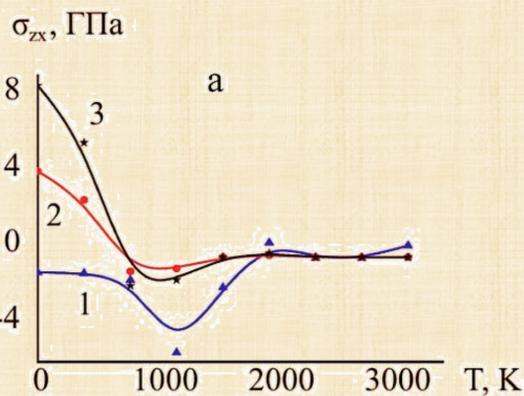


Зависимость деформации ϵ от приложенной нагрузки $P \sim 4.5 \cdot 10^{-2}$ МПа со скоростью $d\epsilon/dt \sim 10^{-2}/c$ (при $T \sim 650$ К; $T/T_g = 1.03$).



Конструкции стержневых нанодендритных спиралевидных подструктур, упрочняющих аморфную матрицу, составленные из правильных тетраэдров (а), геликоидов (б) и плотноупакованных икосаэдров (в).

Результаты МД-моделирования. (а) - температурная релаксации напряжений σ_{zx} в плоскости пленок металлов: 1 — Al, 2 — Ni, 3 — Ti (б) механизм блокирования армирующими листами графена движений дислокаций (в слоях) и сдвиговых деформационных зон (в кристаллических или аморфных нанопленках).



Схематическое представление деформации - (а) литых образцов сплава под нагрузкой (направление нагрузки указано стрелками): сжатие - слева, растяжение - справа; (б) - деформационный механизм «трансфера» нагрузки с увеличением прочности в сотни раз: при давлении -слева и растяжении - справа.

Заключение

Специфика деформационного механизма состоит в формировании в аморфных сплавах свободного объема, ограничении развития динамики точечных и линейных дефектов; формирование дефектной структуры сопровождается выделением тепла.

Высокая прочность армированного графеном композита Ti/G, полученная в результате МД-моделирования, была достигнута не только благодаря деформационному трансферу, но и очень сильно гибридным связям Ti-C в гексагональных плоскостях (модуль Юнга ~ 1 ТПа). В армированном графеном композите Ni/G образующиеся под действием деформационной нагрузки дислокации блокируются и накапливаются (т.е. имеет место их сток) во второй по отношению к графену координационной плоскости Ni (своеобразный пиннинг), не преодолевая «препятствия» сетки связей С-С, что согласуется с данными ПЭМ и СТМ [3- 5].

Из результатов МД-моделирования, находящихся в хорошем согласии с экспериментальными данными, следует, что армированные графеном нанослоистые композиты, как и дендритно-упрочненные аморфные металлокомпозиаты, обладают уникальными прочностными характеристиками и высокой термостабильностью.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО, проект №0396-2019-0002.