

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 536-12

DOI: 10.34680/2076-8052.2024.1(135).123-127

ГРНТИ 29.17.43

Специальность ВАК 1.3.8

Научная статья

РАЗРАБОТКА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОТЖИГА ДЛЯ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

Гордей М. М.^{1, 2}, Метлов Л. С.^{1, 2}

¹ Донецкий физико-технический институт имени А. А. Галкина (Донецк, Россия)

² Донецкий государственный университет (Донецк, Россия)

Аннотация Теоретически проанализирована кривая, демонстрирующая зависимость количества серебра в зернах меди от температуры отжига, составленная в процессе отжига при различных температурах. Предпринята попытка разработки модели на основе подхода неравновесной эволюционной термодинамики для описания процесса отжига. Данная модель протестирована при помощи компьютерного моделирования. С учетом ранее разработанной модели для мегапластической деформации в рамках неравновесной эволюционной термодинамики, был полностью смоделирован эксперимент, который состоял из отжига и дальнейшей обработки методом пластической деформации кручением.

Ключевые слова: модель отжига, свободная энергия, компьютерное моделирование, эволюционное уравнение

Для цитирования: Гордей М. М., Метлов Л. С. Разработка теоретической модели отжига для двухкомпонентных систем // Вестник НовГУ. 2024. 1(135). 123-127. DOI: 10.34680/2076-8052.2024.1(135).123-127

Research Article

DEVELOPMENT OF THE THEORETICAL ANNEALING MODEL FOR TWO-COMPONENT SYSTEMS

Gordei M. M.^{1, 2}, Metlov L. S.^{1, 2}

¹ Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering (Donetsk, Russia)

² Donetsk State University (Donetsk, Russia)

Abstract The curve showing dependence of amount of silver in copper grains on the annealing temperature, compiled during the annealing process at different temperature has been theoretically analyzed. An attempt to develop a model based on the approach of nonequilibrium evolutionary thermodynamics to describe the annealing process was made. This model has been tested using computer simulation. Taking the previously developed model for megaplastic deformation within the framework of nonequilibrium evolutionary thermodynamics into account, the experiment was fully simulated, which consisted of annealing and further processing by plastic torsion deformation.

Keywords: annealing model, free energy, computer simulation, evolution equation

For citation: Metlov L. S., Gordei M. M. Development of the theoretical annealing model for two-component systems // Vestnik NovSU. 2024. 1(135). 123-127. DOI: 10.34680/2076-8052.2024.1(135).123-127

Введение

В ранних работах авторов [1] была поставлена задача построения и проведения компьютерных экспериментов для теоретической модели, описывающей проведение мегапластической деформации и отжига для двухкомпонентной системы. Согласно эксперименту, проведенному в работе [2], в качестве материала для исследования использовался сплав Cu-Ag. В ходе проведения эксперимента, было обнаружено явление, при котором, вследствие обработки пластической деформации кручением, количество растворенного серебра в зернах меди выходило на некоторое стационарное состояние. Данное состояние не зависело от начального количества серебра в зернах меди.

Для решения первой части задачи была разработана теоретическая модель на основе неравновесной эволюционной термодинамики [1], результаты компьютерного моделирования которой совпадали с экспериментом. Попытка решения второй части задачи была предложена в работе [3]. Однако не были уточнены некоторые особенности теоретической модели отжига и проведено соответствующее компьютерное моделирование.

Основная часть

Для построения теоретической модели отжига двухкомпонентного сплава будем пользоваться тем же подходом, который использовался для разработки модели мегапластической деформации на основе неравновесной эволюционной термодинамики.

Будем рассматривать атомы легирующего компонента в матрице основного в качестве точечных дефектов. В качестве термодинамического потенциала будем использовать свободную энергию. Данный выбор обусловлен тем, что изменения происходят в отсутствие внешнего воздействия, например, отсутствует механическое воздействие.

В таком случае, можем представить свободную энергию в качестве разложения по степеням концентрации. Ограничимся второй степенью полинома

$$F = F_0 + ac - \frac{b}{2}c^2, \quad (1)$$

где F_0 – свободная энергия сплава без учета возможности растворения атомов легирующего компонента, c – концентрация растворенного атома, a , b – некоторые коэффициенты разложения, зависящие от температуры.

В уравнении (1), второе и третье слагаемое, моделируют, соответственно, стоки в основную фазу и источник атомов легирующего компонента в твердом растворе.

Это обусловлено тем, что в состоянии равновесия сплав представляет собой двухфазную систему, состоящую из зерен двух компонентов. При этом часть атомов

серебра, растворяется в меди, и, наоборот, медь растворяется в фазе серебра. Часть растворенных атомов вследствие диффузии будет возвращаться в основную фазу. Таким образом, в системе установится два взаимно противоположно направленных потока, и в состоянии равновесия эти потоки будут равны между собой. Если начальное состояние сплава отличается от равновесного, то в результате отжига система в асимптоте переходит в равновесное состояние.

В качестве эволюционного уравнения для описания изменения концентрации легирующего компонента будем использовать уравнение Ландау-Халатникова

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \gamma \frac{\partial F}{\partial c}, \quad (2)$$

где γ – некоторый кинетический коэффициент.

Подставляя уравнение для свободной энергии, после его дифференцирования, получим

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \gamma(a - bc). \quad (3)$$

Соответственно, равновесные значения концентрации легирующего компонента будут определяться как

$$c = \frac{2a}{b}. \quad (4)$$

Для лучшей передачи формы кривой отжига, учитывая, что $a = a(T)$ и $b = b(T)$, можем представить данные коэффициенты в виде полинома

$$\begin{aligned} a &= \alpha_0 - \alpha_1 T + \alpha_2 T^2 - \alpha_3 T^3 \\ b &= \beta_0 + \beta_1 T - \beta_2 T^2 + \beta_3 T^3 \end{aligned} \quad (5)$$

Используя уравнение (3-5) можем рассчитать эволюцию концентрации легирующего компонента в процессе отжига для различных температур (рисунок 1). Для решения данного уравнения будем использовать численные методы, а именно, метод Эйлера.

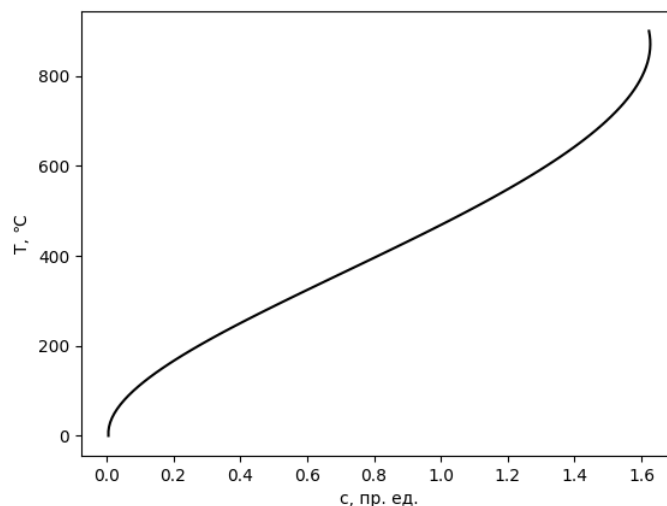


Рисунок 1. Кривая отображающая зависимость равновесной концентрации от температуры

Используя модель для мегапластической деформации, разработанную в работе [1], можем смоделировать выход системы на некоторое стационарное состояние (рисунок 2).

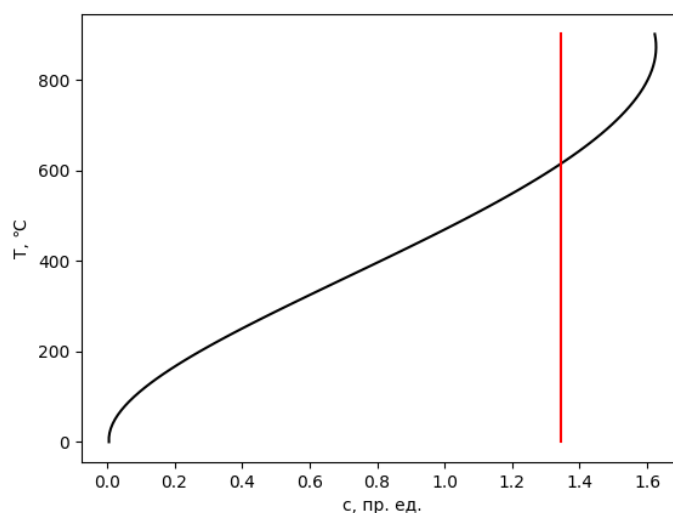


Рисунок 2. Фазовая диаграмма легирующего компонента в процессе МПД: черная линия - кривая отжига сплава; красная линия - стационарное состояние (после МПД)

Заключение

В рамках подхода на основе неравновесной эволюционной термодинамики была построена модель для описания отжига двухкомпонентных сплавов. Также, используя модель для мегапластической деформации, был полностью смоделирован эксперимент из работы [2]. Однако для большего согласования с экспериментальными данными, необходимо уточнение коэффициентов разложения.

Список литературы

1. Metlov L. S., Gordey M. M. Nonequilibrium evolution thermodynamic of poly- and two-components alloys affected by severe plastic deformation // Journal of Physics: Conference Series. 2021. 2052. 012026. DOI: 10.1088/1742-6596/2052/1/012026
2. Straumal B. B., Kilmametov A. R., Baretzky B., Kogtenkova O. A., Straumal P. B., Lityńska-Dobrzyńska L., Chulist R., Korneva A., Zieba P. High pressure torsion of Cu-Ag and Cu-Sn alloys: Limits for solubility and dissolution // Acta Materialia. 2020. 195(4). 184-198. DOI: 10.1016/j.actamat.2020.05.055
3. Метлов Л. С., Гордей М. М. Метод теоретического построения температурной кривой отжига для двухкомпонентного сплава // Донецкие чтения 2023: образование, наука, инновации, культура и вызовы современности: материалы VIII Международной научной конференции, Донецк, 25–27 октября 2023 года. Т. 2: Физические, технические и компьютерные науки. Донецк: Донецкий государственный университет, 2023. С. 135-137.

References

1. Metlov L. S., Gordey M. M. Nonequilibrium evolution thermodynamic of poly- and two-components alloys affected by severe plastic deformation // Journal of Physics: Conference Series. 2021. 2052. 012026. DOI: 10.1088/1742-6596/2052/1/012026
2. Straumal B. B., Kilmametov A. R., Baretzky B., Kogtenkova O. A., Straumal P. B., Lityńska-Dobrzyńska L., Chulist R., Korneva A., Zieba P. High pressure torsion of Cu-Ag and Cu-Sn alloys: Limits for solubility and dissolution // Acta Materialia. 2020. 195(4). 184-198. DOI: 10.1016/j.actamat.2020.05.055
3. Metlov L. S., Gordey M. M. Metod teoreticheskogo postroyeniya temperaturnoy krivoy otzhiga dlya dvukhkomponentnogo splava [Method for theoretically constructing an annealing temperature curve for a two-component alloy] // Donetsk Readings 2023: education, science, innovation, culture and challenges of our time: Materials of the VIII International Scientific Conference. Donetsk, October 25-27, 2023 Vol. 2: Physical, technical and computer sciences. Donetsk: Donetsk National University, 2023. P. 135-137.

Информация об авторах

Гордей Максим Михайлович – студент, Донецкий физико-технический институт имени А. А. Галкина (Донецк, Россия); инженер, Донецкий государственный университет (Донецк, Россия), ORCID: 0009-0008-6187-0612, gordei-maksim@mail.ru

Метлов Леонид Семенович – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Донецкий физико-технический институт имени А. А. Галкина (Донецк, Россия), профессор, Донецкий государственный университет (Донецк, Россия), ORCID: 0000-0003-2876-0768, lsmet@donfti.ru