

УДК 539.89:538.91

## МЕХАНИЧЕСКИЙ ОТКЛИК АМОРФНОГО МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА $Ni_{62}Nb_{38}$ ПРИ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

© 2023 г. Б. Н. Галимзянов<sup>1</sup>, \*, М. А. Доронина<sup>1</sup>, А. В. Мокшин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Казанский (Приволжский) федеральный университет”, Казань, Россия

\*E-mail: bulatgnmail@gmail.com

Поступила в редакцию 28.10.2022 г.

После доработки 15.11.2022 г.

Принята к публикации 26.12.2022 г.

На основе крупномасштабного моделирования молекулярной динамики исследованы механические свойства аморфного металлического сплава  $Ni_{62}Nb_{38}$  при температуре 300 К, связанные с деформациями одноосного сжатия и растяжения. Для данной системы определены кривые “напряжение–деформация”, а также модуль Юнга, предел текучести и предел прочности. Впервые найдено соответствие между значениями модуля Юнга и предела текучести, которое укладывается в эмпирический линейный закон, единый для металлических стекол с различным составом. Показано, что механико-прочностные свойства аморфного сплава  $Ni_{62}Nb_{38}$  являются более выраженными по сравнению с металлическими стеклами другого состава.

DOI: 10.31857/S0367676522701022, EDN: MCZJND

### ВВЕДЕНИЕ

Нахождение аморфных металлических сплавов с требуемыми физико-механическими свойствами принадлежит к актуальным направлениям физики конденсированного состояния и материаловедения [1]. Аморфная структура придает металлическим сплавам уникальное сочетание высокой прочности, превосходной коррозионной стойкости, высокой магнитной проницаемости, высокого предела текучести и повышенной износостойкости [2]. Поэтому эти сплавы относятся к перспективным и могут использоваться в качестве материалов для изготовления хирургических инструментов, сенсоров, автомобильных компонентов, элементов радиоэлектроники. За последние десятилетия был получен значительный объем экспериментальных и симуляционных данных по свойствам аморфных металлических сплавов различного состава. Анализ этих данных, в том числе, методами машинного обучения, позволил выявить универсальные закономерности в механическом отклике этих сплавов и показать, что прочностные свойства, преимущественно, определяются основным элементом сплава [3, 4].

Из существующих экспериментальных наблюдений следует, что наиболее способным к формированию устойчивой аморфной структуры является такой металлический сплав, который представлен компонентами (атомами) различных размеров [5, 6]. С другой стороны, с ростом числа

компонент происходит усложнение диаграммы состояния сплава, что, в свою очередь, осложняет определение сосуществующих фаз и их химического состава в зависимости от заданных термодинамических условий. В производстве аморфных металлических сплавов зачастую предпочтительнее отдается бинарным сплавам, структура и физико-механические свойства которых относительно легче поддаются предсказанию.

Бинарный сплав  $Ni_{62}Nb_{38}$  принадлежит к известным бинарным сплавам, способным формировать объемную аморфную фазу [7]. Пристальное внимание непосредственно к сплаву  $Ni_{62}Nb_{38}$  стало уделяться после того, как в начале XXI в. было синтезировано объемное металлическое стекло с устойчивой аморфной структурой [8]. Аморфный сплав  $Ni_{62}Nb_{38}$  имеет твердость  $\approx 15$  ГПа и предел прочности  $\approx 4$  ГПа, что существенно выше, чем в случае других бинарных аморфообразующих систем [9]. В то же время механический отклик этого сплава на внешнюю деформацию сжатия достаточно детально исследован, в то время как результаты испытаний на растяжение представлены в научной литературе не в полной мере. Отсутствуют какие-либо сведения, связанные с установлением соответствий между ключевыми механическими характеристиками (модулем Юнга, пределом текучести), что позволило бы проверить выполнение известных эмпирических пра-

вил, характерных для аморфных металлических сплавов [10].

Было выполнено моделирование молекулярной динамики процесса одноосного растяжения и одноосного сжатия аморфного сплава  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ . Выполнена оценка значений таких механических характеристик, как модуль Юнга, предел текучести и предел прочности. Впервые найдено соответствие между значениями модуля Юнга и предела текучести. Показано, что это соответствие воспроизводится эмпирическим линейным законом, единым для металлических стекол разного состава.

### ДЕТАЛИ РАСЧЕТОВ И ИСППОЛЬЗУЕМЫЕ МЕТОДЫ

Рассмотрена система  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ , состоящая из 13203 атомов никеля и 8093 атомов ниобия. Атомы располагаются внутри ячейки моделирования кубической формы с периодическими граничными условиями по всем направлениям. Энергия и силы межатомного взаимодействия определяются с помощью полуэмпирического потенциала Финниса–Синклера (Finnis–Sinclair) [11]:

$$U = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \varphi_{\alpha_i \alpha_j}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N \Phi_{\alpha_i}(\rho_i). \quad (1)$$

Здесь  $N$  – число атомов,  $r_{ij}$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ,  $\varphi_{\alpha_i \alpha_j}(r_{ij})$  – парный потенциал,  $\Phi_{\alpha_i}(\rho_i)$  – функция вложенной энергии. В выражении (1) плотность электронного облака  $\rho_i$  определяется следующим образом:

$$\rho_i = \sum_{j=i+1}^N \Psi_{\alpha_i \alpha_j}(r_{ij}), \quad (2)$$

где  $\Psi_{\alpha_i \alpha_j}(r_{ij})$  – функция плотности.

Атомы исходной системы располагаются в узлах кристаллической решетки кубической фазы B2 при температуре  $T = 0$  К. Часть атомов ниобия случайным образом заменяется атомами никеля для получения требуемой пропорции: Ni – 62% и Nb – 38%. Полученная кристаллическая структура нагревается до температуры  $T = 2500$  К при давлении  $p = 1$  атм. и приводится в состояние термодинамического равновесия. При рассматриваемом давлении температура ликвидуса сплава  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  составляет  $T_l \approx 1550$  К [12, 13]. Для получения аморфного металлического стекла приготовленный жидкий расплав охлаждается со скоростью  $1 \cdot 10^{12}$  К · с<sup>-1</sup> до температуры  $T = 300$  К. Данная температура находится гораздо ниже температуры стеклования  $T_g \approx 1020$  К [11, 13]. На всех расчетных этапах температура и давление кон-

тролируются с помощью термостата и баростата Ноэ–Гувера [14].

Моделирование молекулярной динамики процесса деформации аморфных образцов осуществляется в вычислительном пакете Lammmps [15]. Образцы подвергаются одноосному растяжению и одноосному сжатию с постоянной (фиксированной) скоростью  $\dot{\gamma} = 1 \cdot 10^{10}$  с<sup>-1</sup>. Отметим, что скорости деформации порядка  $\sim 10^{10}$  с<sup>-1</sup> достижимы на эксперименте, например, при воздействии на материал взрывной волны и при высокоскоростном столкновении с ударным снарядом [16, 17]. В рассматриваемой работе действие деформации распространяется лишь вдоль направления оси  $OX$ . Оценка величины напряжения, возникающего при растяжении и сжатии образцов, осуществляется с помощью известного выражения Ирвина–Кирквуда [18, 19]:

$$\sigma_{xx} = -\frac{1}{V} \left( \sum_{i=1}^N m_i v_{ix}^2 \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N F_{ijx} r_{ijx}. \quad (3)$$

Здесь,  $V$  – объем системы,  $m$  – масса  $i$ -го атома;  $v_{ix}$  –  $x$ -компонента скорости  $i$ -го атома;  $F_{ijx}$  –  $x$ -компонента силы между атомами  $i$  и  $j$ , находящимися на расстоянии  $r_{ijx}$  друг от друга. Для оценки значений основных механических характеристик строится диаграмма “напряжение–деформация”. Модуль Юнга определяется из наклона линейного участка этой диаграммы, соответствующего упругой деформации:

$$E_T = \frac{\sigma_{xx}(t)}{\epsilon(t)}, \quad (4)$$

$$\epsilon(t) = \frac{L_x(t) - L_{x0}}{L_{x0}} \quad (5)$$

для случая растяжения и

$$E_C = \frac{\sigma_{xx}(t)}{\xi(t)}, \quad (6)$$

$$\xi(t) = \frac{L_{x0} - L_x(t)}{L_{x0}} \quad (7)$$

для случая сжатия. Здесь  $L_{x0} = 7.3$  нм – есть длина ячейки моделирования до деформации;  $L_x(t)$  – длина ячейки моделирования в момент времени  $t$  после начала деформации. Деформация образцов продолжается до их полного разрушения и составляет  $\approx 20\%$  от их первоначального размера. Для статистической обработки полученных результатов проводится серия молекулярно-динамических расчетов для 10 различных аморфных образцов, приготовленных при одинаковых термодинамических условиях.

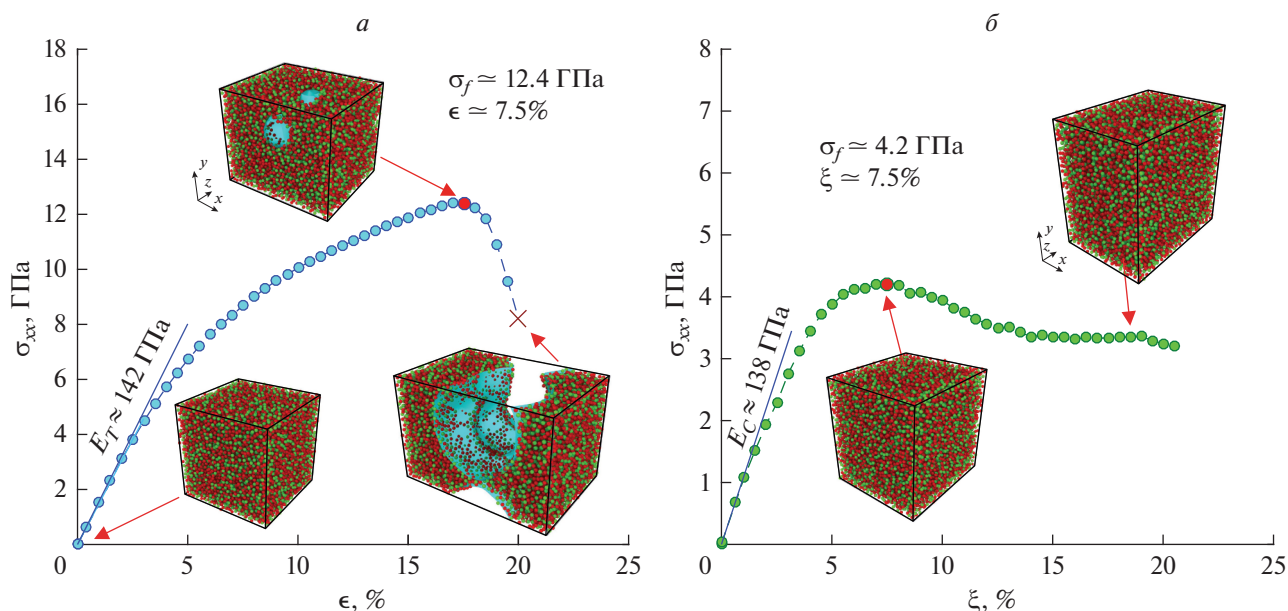


Рис. 1. Диаграмма растяжения и сжатия аморфного сплава  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ .

### МЕХАНИЧЕСКИЙ ОТКЛИК СИСТЕМЫ НА РАСТЯЖЕНИЕ И СЖАТИЕ

На основе результатов моделирования молекулярной динамики построены диаграммы растяжения и сжатия для аморфного сплава  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ . Из рис. 1 видно, что в этих диаграммах явно проявляются области упругой и пластической деформаций. Найденные значения модуля Юнга составляют  $E_T \approx 142 \pm 12$  ГПа при растяжении и  $E_C \approx 138 \pm 10$  ГПа при сжатии. Эти значения являются сопоставимыми, так как в упругой области величина деформации незначительна и составляет  $\sim 2\%$ . Тем самым, в упругой области смещения атомов относительно друг друга также незначительны. Поэтому далее в настоящей работе мы будем полагать, что модуль Юнга для случаев растяжения и сжатия характеризуется одинаковым значением, равным  $E = (E_T + E_C)/2 \approx 140 \pm 10$  ГПа. В то же время, из рис. 1 видно, что пределы прочности, при превышении которых образец начинает необратимо разрушаться, составляют  $\sigma_f \approx 12.4$  ГПа (при растяжении) и  $\sigma_f \approx 4.2$  ГПа (при сжатии). Для сравнения в испытаниях на сжатие аморфных стержней  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  толщиной 2 мм было установлено, что модуль Юнга  $E_C^{(\text{эксп})} \approx 231$  ГПа и предел прочности  $\sigma_f^{(\text{эксп})} \approx 3.1$  ГПа. Эти значения механических характеристик являются самыми высокими среди бинарных объемных металлических стекол [20]. Примечательно, что результаты моделирования приводят к заниженным значениям механических характеристик по сравнению с экспериментальными данными. Это может быть от-

части обусловлено тем, что скорости деформации образцов в моделировании и на эксперименте существенно отличаются [21, 22].

Из рис. 1а видно, что в диаграмме растяжения переход из упругой к пластической деформации является слабо выраженным, а именно, в диаграмме отсутствует “площадка текучести”, типичная для большинства металлических сплавов, где напряжение слабо зависит от деформации [23]. Отсутствие площадки текучести в рассматриваемой диаграмме растяжения обусловлено тем, что при переходе к режиму пластической деформации аморфная система не испытывает структурно-фазовых трансформаций. Поэтому в настоящей работе мы определяем условный (технический) предел текучести  $\sigma_{y0.2}$  при 0.2% пластической деформации [24]. Найденное значение условного предела текучести  $\sigma_{y0.2}$  составляет  $3.0 \pm 0.2$  ГПа, и это значение является близким к экспериментальным значениям предела текучести  $\sigma_y$ , рассчитанным для других бинарных аморфных сплавов на основе Ni. Так, например, для аморфного сплава  $\text{Ni}_{50}\text{Nb}_{50}$  предел текучести  $\sigma_y = 2.26$  ГПа [25], для системы  $\text{Ni}_{61}\text{Ta}_{39} - \sigma_y = 3.35$  ГПа [26].

Процесс разрушения аморфного сплава  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  при растяжении начинается после формирования наноразмерных полостей со средним линейным размером  $\approx 2$  нм, которые становятся очагами формирования трещин (см. рис. 1а). При растяжении интенсивное формирование таких полостей начинается при деформациях более 17%. В случае сжатия при деформациях более 7%

**Таблица 1.** Значения механических характеристик различных металлических стекол:  $E$  – модуль Юнга,  $\sigma_y$  – предел текучести. Экспериментальные данные взяты из работ [10, 25]

№	Химическая формула	Модуль Юнга $E$ , ГПа	Предел текучести $\sigma_y$ , ГПа
Сплавы на основе Ni			
1	Ni <sub>62</sub> Nb <sub>38</sub> (МД: настоящая работа)	140 ± 10	3.0 ± 0.2
2	Ni <sub>39.8</sub> Cu <sub>5.97</sub> Ti <sub>15.92</sub> Zr <sub>27.86</sub> Al <sub>9.95</sub> Si <sub>0.5</sub>	117	2.32
3	Ni <sub>40</sub> Cu <sub>5</sub> Ti <sub>16.5</sub> Zr <sub>28.5</sub> Al <sub>10</sub>	122	2.3
4	Ni <sub>40</sub> Cu <sub>6</sub> Ti <sub>16</sub> Zr <sub>28</sub> Al <sub>10</sub>	111	2.18
5	Ni <sub>40</sub> Ti <sub>17</sub> Zr <sub>28</sub> Al <sub>10</sub> Cu <sub>5</sub>	134	2.3
6	Ni <sub>45</sub> Ti <sub>20</sub> Zr <sub>25</sub> Al <sub>10</sub>	114	2.37
7	Ni <sub>50</sub> Nb <sub>50</sub>	132	2.26
8	Ni <sub>52.5</sub> Zr <sub>20</sub> Nb <sub>15</sub> Pd <sub>12.5</sub>	145	2.71
9	Ni <sub>55</sub> Zr <sub>20</sub> Nb <sub>15</sub> Pd <sub>10</sub>	146	2.71
10	Ni <sub>60</sub> Nb <sub>35</sub> Sn <sub>5</sub>	184	3.85
11	Ni <sub>60</sub> Sn <sub>6</sub> (Nb <sub>0.6</sub> Ta <sub>0.4</sub> ) <sub>34</sub>	164	3.58
12	Ni <sub>60</sub> Sn <sub>6</sub> (Nb <sub>0.8</sub> Ta <sub>0.2</sub> ) <sub>34</sub>	161	3.5
13	Ni <sub>60</sub> Zr <sub>20</sub> Nb <sub>15</sub> Pd <sub>5</sub>	148	2.75
14	Ni <sub>62.5</sub> Zr <sub>20</sub> Nb <sub>15</sub> Pd <sub>2.5</sub>	150	2.81
Сплавы на основе Cu			
15	Cu <sub>50</sub> Zr <sub>50</sub>	85	1.92
16	Cu <sub>50</sub> Zr <sub>45</sub> Al <sub>5</sub>	102	1.89
17	Cu <sub>55</sub> Zr <sub>30</sub> Ti <sub>10</sub> Co <sub>5</sub>	130	2.31
18	Cu <sub>55</sub> Zr <sub>40</sub> Ga <sub>5</sub>	109	2.03
19	Cu <sub>57.5</sub> Hf <sub>27.5</sub> Ti <sub>15</sub>	103	1.94
20	Cu <sub>57.5</sub> Zr <sub>40</sub> Ga <sub>2.5</sub>	105	1.91
21	Cu <sub>60</sub> Hf <sub>10</sub> Zr <sub>20</sub> Ti <sub>10</sub>	101	1.95
22	Cu <sub>60</sub> Hf <sub>30</sub> Ti <sub>10</sub>	124	2.16
23	Cu <sub>60</sub> Zr <sub>20</sub> Hf <sub>10</sub> Ti <sub>10</sub>	101	2.05
24	Cu <sub>60</sub> Zr <sub>33</sub> Ti <sub>7</sub>	96	2.16
25	Cu <sub>64</sub> Zr <sub>36</sub>	92	2.0
Сплавы на основе Fe			
26	Fe <sub>65</sub> Mo <sub>14</sub> C <sub>15</sub> B <sub>6</sub>	195	3.8
27	Fe <sub>48</sub> Cr <sub>15</sub> Mo <sub>14</sub> C <sub>15</sub> B <sub>6</sub> Er <sub>2</sub>	213	4.2
28	Fe <sub>50</sub> Cr <sub>15</sub> Mo <sub>14</sub> C <sub>15</sub> B <sub>6</sub>	217	4.17
29	Fe <sub>53</sub> Cr <sub>15</sub> Mo <sub>14</sub> Er <sub>1</sub> C <sub>15</sub> B <sub>6</sub>	195	4.2
30	Fe <sub>59</sub> Cr <sub>6</sub> Mo <sub>14</sub> C <sub>15</sub> B <sub>6</sub>	204	4.4
31	Fe <sub>60.5</sub> Cr <sub>4</sub> Mo <sub>14</sub> C <sub>15</sub> B <sub>6</sub> Er <sub>0.5</sub>	202	4.0
32	Fe <sub>61</sub> Mn <sub>10</sub> Cr <sub>4</sub> Mo <sub>6</sub> Er <sub>1</sub> C <sub>15</sub> B <sub>6</sub>	193	4.16
33	Fe <sub>62</sub> Cr <sub>3</sub> Mo <sub>10</sub> P <sub>12</sub> C <sub>10</sub> B <sub>3</sub>	172	3.4
34	Fe <sub>63</sub> Cr <sub>3</sub> Mo <sub>10</sub> P <sub>12</sub> C <sub>10</sub> B <sub>2</sub>	178	3.4
35	Fe <sub>63</sub> Cr <sub>3</sub> Mo <sub>10</sub> P <sub>12</sub> C <sub>7</sub> B <sub>5</sub>	173	3.4
36	Fe <sub>63</sub> Cr <sub>3</sub> Mo <sub>10</sub> P <sub>12</sub> C <sub>8</sub> B <sub>4</sub>	175	3.4
37	Fe <sub>63</sub> Cr <sub>3</sub> Mo <sub>10</sub> P <sub>12</sub> C <sub>9</sub> B <sub>3</sub>	175	3.5
38	Fe <sub>63</sub> Mo <sub>14</sub> C <sub>15</sub> B <sub>6</sub> Er <sub>2</sub>	204	4.0
39	Fe <sub>64</sub> Cr <sub>3</sub> Mo <sub>10</sub> P <sub>10</sub> C <sub>10</sub> B <sub>3</sub>	176	3.4
40	Fe <sub>66</sub> Cr <sub>3</sub> Mo <sub>10</sub> P <sub>8</sub> C <sub>10</sub> B <sub>3</sub>	177	3.4
41	Fe <sub>68</sub> Cr <sub>3</sub> Mo <sub>10</sub> P <sub>6</sub> C <sub>10</sub> B <sub>3</sub>	180	3.5
42	Fe <sub>76</sub> Si <sub>9.6</sub> B <sub>8.4</sub> P <sub>6</sub>	165	3.21
43	Fe <sub>80</sub> P <sub>13</sub> C <sub>7</sub>	137	3.14

Таблица 1. Продолжение

№	Химическая формула	Модуль Юнга $E$ , ГПа	Предел текучести $\sigma_y$ , ГПа
Сплавы на основе Mg			
44	$Mg_{61}Cu_{28}Gd_{11}$	52	1.08
45	$Mg_{65}Cu_{10}Ag_5Gd_{10}Ni_{10}$	72	1.01
46	$Mg_{65}Cu_{12.5}Ag_5Gd_{10}Ni_{7.5}$	70	0.97
47	$Mg_{65}Cu_{15}Ag_5Gd_{10}Ni_5$	68	0.9
48	$Mg_{65}Cu_{17.5}Ag_5Gd_{10}Ni_{2.5}$	67	0.84
49	$Mg_{65}Cu_{20}Ag_5Gd_{10}$	65	0.82
50	$Mg_{65}Cu_{20}Y_{15}$	69	0.82
51	$Mg_{65}Cu_{25}Gd_{10}$	51	0.83
52	$Mg_{65}Cu_{25}Tb_{10}$	51	0.8
53	$Mg_{65}Cu_{25}Y_{10}$	50	0.68
54	$Mg_{65}Cu_{25}Y_8Gd_2$	52	1.03
55	$Mg_{65}Y_{10}Cu_{15}Ag_5Pd_5$	59	0.77
Сплавы на основе Ti			
56	$Ti_{32.8}Zr_{30.2}Ni_{5.3}Cu_9Be_{22.7}$	98	1.83
57	$Ti_{40}Zr_{25}Cu_{12}Ni_3Be_{20}$	94	1.78
58	$Ti_{45}Zr_{10}Pd_{10}Cu_{31}Sn_4$	95	1.97
59	$Ti_{45}Zr_{20}Be_{30}Cr_5$	106	1.72
60	$Ti_{45}Zr_{20}Be_{35}$	97	1.86
61	$Ti_{50}Cu_{20}Ni_{24}B_1Si_2Sn_3$	110	2.1
62	$Ti_{50}Cu_{23}Ni_{20}Sn_7$	85	1.3
Сплавы на основе Pd			
63	$Pd_{40}Cu_{30}Ni_{10}P_{20}$	98	1.52
64	$Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$	108	1.74
65	$Pd_{60}Cu_{20}P_{20}$	91	1.7
66	$Pd_{64}Ni_{16}P_{20}$	92	1.55
67	$Pd_{77.5}Cu_6Si_{16.5}$	90	1.51
68	$Pd_{80}Si_{20}$	70	1.34
Сплавы на основе Zr			
69	$Zr_{41}Ti_{14}Cu_{12.5}Ni_{10}Be_{22.5}$	101	1.8
70	$Zr_{45}Cu_{39.3}Ag_{8.7}Al_7$	94	1.84
71	$Zr_{46}Cu_{37.6}Ag_{8.4}Al_8$	92	1.82
72	$Zr_{46}Cu_{46}Al_8$	96	1.67
73	$Zr_{46.75}Ti_{8.25}Cu_{7.5}Ni_{10}Be_{27.5}$	100	1.83
74	$Zr_{48}Cu_{45}Al_7$	90	1.9
75	$Zr_{52.25}Cu_{28.5}Ni_{4.75}Al_{9.5}Ta_5$	90	1.91
76	$Zr_{55}Al_{19}Co_{19}Cu_7$	102	2.2
77	$Zr_{57.5}Nb_5Cu_{15.4}Ni_{12}Al_{10}$	85	1.58
78	$Zr_{57}Cu_{20}Al_{10}Ni_8Ti_5$	82	1.49
79	$Zr_{57}Nb_5Cu_{15.4}Ni_{12.6}Al_{10}$	87	1.8
80	$Zr_{60}Fe_5Al_{10}Cu_{25}$	92	1.64
81	$Zr_{60}Ni_{25}Al_{15}$	81	1.79
82	$Zr_{61.88}Cu_{18}Ni_{10.12}Al_{10}$	80	1.73
83	$Zr_{61}Ti_2Cu_{25}Al_{12}$	83	1.63
84	$Zr_{62}Cu_{15.4}Ni_{12.6}Al_{10}$	80	1.81
85	$Zr_{65}Al_{10}Ni_{10}Cu_{15}$	83	1.45

Таблица 1. Окончание

№	Химическая формула	Модуль Юнга $E$ , ГПа	Предел текучести $\sigma_y$ , ГПа
Сплавы на основе редкоземельных элементов			
86	$Ce_{70}Al_{10}Ni_{10}Cu_{10}$	30	0.49
87	$Dy_{55}Al_{25}Co_{20}$	61	0.72
88	$Er_{55}Al_{25}Co_{20}$	71	1.12
89	$Ho_{55}Al_{25}Co_{20}$	67	0.87
90	$La_{55}Al_{25}Co_{20}$	41	0.99
91	$La_{55}Al_{25}Cu_{10}Ni_5Co_5$	42	0.5
92	$Nd_{60}Al_{10}Fe_{20}Co_{10}$	51	0.45
93	$Pr_{55}Al_{25}Co_{20}$	46	1.01
94	$Tb_{55}Al_{25}Co_{20}$	60	0.83
95	$Yb_{62.5}Zn_{15}Mg_{17.5}Cu_5$	27	0.45

уплотнение системы является критическим, что приводит к разрушению системы (см. рис. 1б). Таким образом, аморфный сплав  $Ni_{62}Nb_{38}$  обладает более высокой сопротивляемостью к растяжению, чем к сжатию.

Рисунок 2 показывает соответствие между модулем Юнга  $E$  и пределом текучести  $\sigma_y$  для металлических стекол различного состава. Здесь экспериментальные данные, взятые из [10, 25], сравниваются с результатами моделирования настоящей работы. Из рис. 2 видно существование линейной зависимости между  $E$  и  $\sigma_y$  с наклоном  $E/\sigma_y \approx 50$ . Наличие такой универсальной зависимости для различных металлических стекол свя-

зано с тем, что характер межатомных сил притяжения и отталкивания един для металлических систем. Наличие такой линейной зависимости с наклоном  $\approx 50$  также было установлено ранее на основе анализа экспериментальных данных для более 300 металлических стекол [10]. Значения  $E$  и  $\sigma_y$ , найденные из моделирования молекулярной динамики сплава  $Ni_{62}Nb_{38}$ , также укладываются в эту линейную зависимость и находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными, полученными для металлических стекол на основе Ni (см. рис. 2). Результат моделирования для сплава  $Ni_{62}Nb_{38}$  предсказывает прочностные свойства, сопоставимые с прочностью металлических стекол на основе Fe.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом моделирования молекулярной динамики выполнен расчет основных механических характеристик аморфного сплава  $Ni_{62}Nb_{38}$  при растяжении и сжатии. Построены диаграммы растяжения и сжатия. Впервые показано соответствие между значениями модуля Юнга и предела текучести, которое укладывается в экспериментально установленный линейный закон, единый для металлических стекол с различным составом. Показано, что площадка текучести слабо проявляется в полученных диаграммах растяжения и сжатия. Полученные результаты обнаруживают, что механико-прочностные свойства аморфного сплава  $Ni_{62}Nb_{38}$  оказываются более выраженными по сравнению с металлическими стеклами другого состава и являются сопоставимыми с механическими свойствами металлических стекол на основе железа. Результаты настоящего исследования могут быть использованы для выявления универсальных закономерностей для механических характеристик аморфных металлических стекол при деформации растяжения и сжатия.

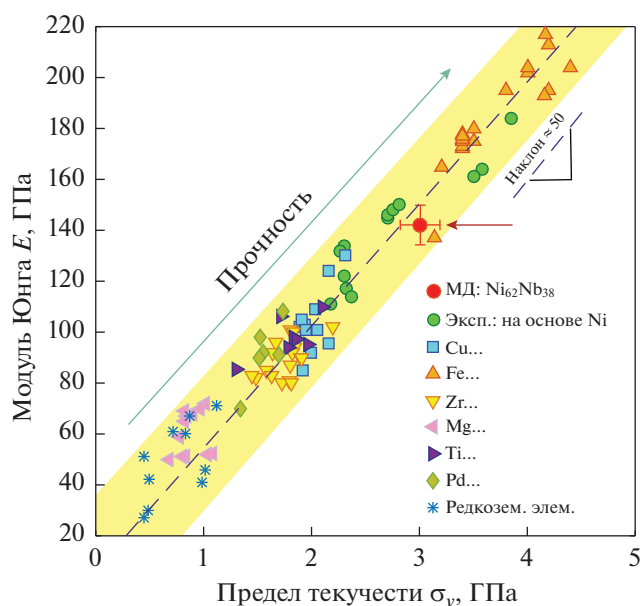


Рис. 2. Соответствие между модулем Юнга и пределом текучести для различных металлических стекол. Данные взяты из табл. 1.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00022). АВМ выражает признательность Фонду развития теоретической физики и математики “Базис” (№ 20-1-2-38-1).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Schroers J.* // Adv. Mater. 2010. V. 22. P. 1566.
2. *Kruzic J.J.* // Adv. Engin. Mater. 2016. V. 18. P. 1308.
3. *Xiong J., Shi S.-Q., Zhang T.-Y.* // Mater. Design. 2020. V. 187. Art. No. 108378.
4. *Ward L., O’Keeffe S.C., Stevick J. et al.* // Acta Mater. 2018. V. 159. P. 102.
5. *Schuler J.D., Rupert T.J.* // Acta Mater. 2017. V. 140. P. 196.
6. *Galimzyanov B.N., Mokshin A.V.* // J. Non-Cryst. Solids. 2021. V. 570. Art. No. 121009.
7. *Jones M.R., DelRio F.W., Pegues J.W. et al.* // J. Mater. Res. 2021. V. 36. P. 3167.
8. *Xia L., Li W.H., Fang S.S. et al.* // J. Appl. Phys. 2006. V. 99. Art. No. 026103.
9. *Lu W., Tseng J.-C., Feng A. et al.* // J. Non-Cryst. Solids. 2021. V. 564. Art. No. 120834.
10. *Qu R.T., Liu Z.Q., Wang R.F. et al.* // J. Alloys Compounds. 2015. V. 637. P. 44.
11. *Zhang Y., Ashcraft R., Mendeleev M.I. et al.* // J. Chem. Phys. 2016. V. 145. Art. No. 204505.
12. *Lesz S., Dercz G.* // J. Therm. Analyt. Calorim. 2016. V. 126. P. 19.
13. *Galimzyanov B.N., Doronina M.A., Mokshin A.V.* // J. Non-Cryst. Solids. 2021. V. 572. Art. No. 121102.
14. *Tuckerman M.E., Alexandre J., López-Rendón R. et al.* // J. Phys. A. 2006. V. 39. P. 5629.
15. *Shinoda W., Shiga M., Mikami M.* // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. Art. No. 134103.
16. *Bringa E.M., Caro A., Wang Y. et al.* // Science. 2005. V. 309. P. 1838.
17. *Shen L.-M.* // Acta Mech. Sin. 2012. V. 28. P. 1125.
18. *Evans D.J., Morriss G.P.* Statistical mechanics of non-equilibrium liquids. Cambridge University Press, 2008. 328 p.
19. *Galimzyanov B.N., Mokshin A.V.* // Int. J. Solids Struct. 2021. V. 224. Art. No. 111047.
20. *Xia L., Shan S.T., Ding D. et al.* // Intermetallics. 2007. V. 15. P. 1046.
21. *Teker E., Danish M., Gupta M.K. et al.* // Trans. Indian Inst. Met. 2022. V. 75. P. 717.
22. *Fan H., Wang Q., El-Awady J.A. et al.* // Nature Commun. 2021. V. 12. P. 1845.
23. *Courtney T.H.* Mechanical behavior of materials. Wiley, 2005. 752 p.
24. *Бобылев А.В.* Механические и технологические свойства металлов. Справочник. М.: Металлургия, 1980.
25. *Wang W.H.* // J. Appl. Phys. 2006. V. 99. Art. No. 093506.
26. *Wang Y., Wang Q., Zhao J. et al.* // Scripta Mater. 2010. V. 63. P. 178.

## Mechanical response of amorphous $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ metallic alloy under uniaxial deformation

B. N. Galimzyanov<sup>a,\*</sup>, M. A. Doronina<sup>a</sup>, A. V. Mokshin<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Kazan Federal University, Kazan, 420008 Russia

\*e-mail: bulatgnmail@gmail.com

The mechanical properties of amorphous  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  alloy associated with uniaxial compression and uniaxial tensile are studied at the temperature 300 K based on the large-scale molecular dynamic’s simulations. Stress-strain curves, Young’s modulus, yield strength, and tensile strength are determined for this system. For the first time, some correspondence was found between the values of Young’s modulus and the yield strength, which fits into the experimentally established linear law, which is the same for metallic glasses with different compositions. It is shown that the mechanical and strength properties of amorphous  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  alloy are more pronounced than those of metallic glasses with a different composition.