

01;05

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОФИЛЕЙ $\gamma$ -ПОВЕРХНОСТЕЙ В СПЛАВАХ СО СВЕРХСТРУКТУРАМИ НА ОСНОВЕ ОЦК РЕШЕТКИ

© *Т.И.Новичихина, М.А.Баранов,  
М.Д.Старостенков, В.В.Романенко*

Известно, что макроскопическое отражение физических и физико-механических свойств материалов во многом определяется состояниями, реализуемыми на атомных уровнях [1], наличием отклонений в кристаллической структуре упаковки от идеальной. Вследствие малости размеров дефектов в кристаллах прямое наблюдение их в колонне электронного микроскопа представляется технически сложной проблемой. В то же время приобретают достаточно широкое распространение методы моделирования дефектных зон в кристаллах, такие как построение энергетического профиля поверхности относительного сдвига частей кристалла ( $\gamma$ -поверхности) [2]. Профиль  $\gamma$ -поверхности представляет собой совокупность энергетических барьеров, препятствующих сдвигу, и потенциальных ям основных и промежуточных состояний, соответствующих дефекту. В металлах и регулярных твердых растворах промежуточные состояния соответствуют дефектам упаковки (ДУ), — как правило, продуктам реакций дислокационных превращений. Энергия образования дефекта, а также вектор сдвига (Бюргерса), формирующий его, во многом определяют пластическое поведение материала [3]. В упорядоченных сплавах на профиле  $\gamma$ -поверхности могут наблюдаться несколько минимумов, соответствующих различным плоским дефектам. В сверхструктурах принято различать следующие типы плоских дефектов: антифазная граница (АФГ) — дефект, получающийся в результате сдвига одной половины кристалла на вектор, соединяющий различные подрешетки сплава, — вектор антифазности; сверхструктурный дефект упаковки (СДУ) может быть получен сдвигом полукристалла на вектор, не являющийся вектором решетки, но приводящим кристалл в промежуточное метастабильное состояние; комплексный дефект упаковки (КДУ), который получается в результате сдвига полукристалла в другое промежуточное состояние. Векторы сдвига, соответствующие СДУ и КДУ, отличаются на вектор антифазности. То есть КДУ пони-

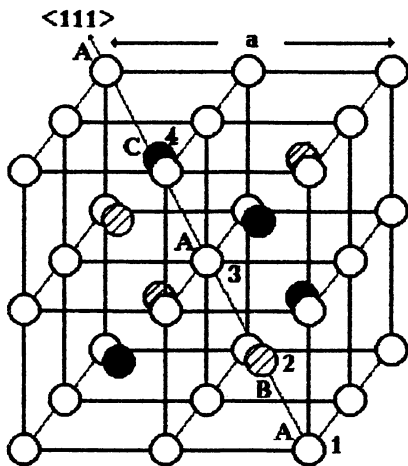
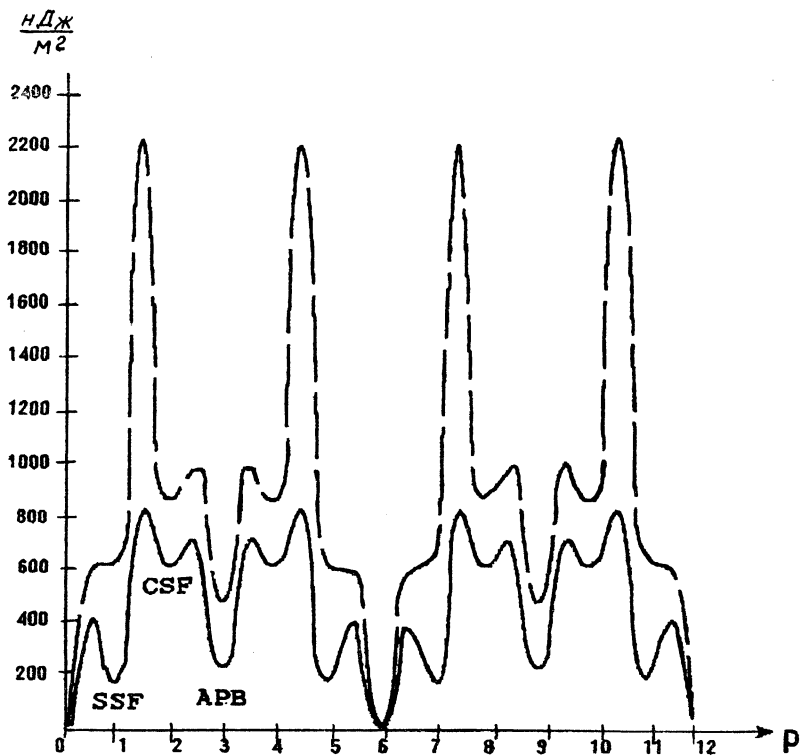


Рис. 1. Элементарная ячейка сверхструктуры  $L_{21}$ .

мается как наложение СДУ и АФГ. В сплавах на основе ОЦК решетки выделяются двухкомпонентные сверхструктуры  $B_2$  (состава  $AB$ ),  $DO_3$  (состава  $AB_3$ ) и трехкомпонентная  $L_{21}$  (состава  $A_2BC$ ). Элементарная ячейка сверхструктуры  $L_{21}$  представлена на рис. 1. Сверхструктура  $DO_3$  получается из  $L_{21}$  путем замены атомов сорта  $C$  на  $A$ , а  $B_2$  путем замены  $C$  на  $B$ , что приводит к уменьшению вектора полной трансляции вдвое. АФГ в сверхструктуре  $B_2$  характеризуются единственно возможным вектором сдвига  $1/4\langle 111 \rangle$  (здесь и в дальнейшем модули векторов приводятся в параметрах решетки сверхструктуры  $L_{21}$ ). Разрезы  $\gamma$ -поверхностей в сверхструктурах  $B_2$  и  $DO_3$  проанализированы в [4-6]. В настоящей работе проводится сравнительный анализ  $\gamma$ -профилей в упомянутых сверхструктурах на примере сплавов  $NiAl$ ,  $Fe_3Al$ ,  $Ni_2AlNb$ . Взаимодействия между атомами полагались парными, центральными и аппроксимировались функцией Морза.

Параметры потенциалов определялись на основе свойств металлов-компонентов, а также на основе свойств сплава. Экспериментально и теоретически доказано, что деформация в кристаллах на основе ОЦК решетки происходит путем так называемого карандашного скольжения в направлении  $\langle -111 \rangle$  [3]. Поэтому представляет интерес изучение профиля  $\gamma$ -поверхности в плоскостях скольжения, принадлежащих именно к этой зоне —  $(110)$ ,  $(211)$ ,  $(321)$ , ...

Для моделирования выбирался блок кристалла, состоящий из сорока плоскостей, и производился сдвиг одной из его половин на вектор  $\alpha\langle -111 \rangle$ , где  $0 < \alpha < 1$ . По две



**Рис. 2.** Зависимость энергии образования дефекта, полученного сдвигом на вектор  $P/12\langle -111 \rangle$  в плоскости (211) в сверхструктуре: *a* — B2, *б* — DO<sub>3</sub>, *в* — L<sub>21</sub>. SSF — superstructure stacking fault — сверхструктурный дефект упаковки, CSF — complex stacking fault — комплексный дефект упаковки, APB — antiphase boundary — антифазная граница.

плоскости с каждого края блока закреплялись. Всем атомам, не принадлежащим закрепляемым плоскостям, предоставлялась возможность смещаться в направлении действующих на них сил вплоть до достижения блоком минимума внутренней энергии, которая определялась на каждом шаге релаксации. Наибольший же интерес представляют значения внутренней энергии, соответствующие стартовой конфигурации блока и его конечному состоянию.

На рис. 2 представлены профили  $\gamma$ -поверхностей в рассматриваемых сплавах в плоскости скольжения (211). Для наглядности  $\gamma$ -поверхности, соответствующие сверхструктуре B2, представлены в удвоенном периоде. Состояние релаксированной решетки изображено сплошной линией, а стартовой конфигурации — пунктирной. Из рисунка вид-

но, что в стартовом состоянии на  $\gamma$ -поверхности число максимумов, а следовательно, и минимумов не соответствует релаксированному состоянию. Поэтому в некоторых случаях можно прийти к ошибочному заключению о нестабильности дефекта, не проведя релаксации решетки, что, по-видимому, и было сделано в [3]. Например, в сверхструктуре В2 СДУ все же оказывается стабильным, несмотря на высокую стартовую энергию образования. В плоскостях (110) и (321), также принадлежащих к зоне  $\langle -111 \rangle$ , профили  $\gamma$ -поверхностей оказываются аналогичными вышеприведенным с небольшими количественными отличиями, что лишний раз доказывает реальность карандашного скольжения в таких сплавах. В плоскостях (110) и (211) атомы испытывают смещения в направлении нормали к плоскости и в одном из сдвиговых направлений. Для плоскости (110) таковым является направление  $\langle 001 \rangle$ , а для (211) —  $\langle 0 - 11 \rangle$ . В плоскостях (321) оказывается невозможным указать единственное направление сдвига для всех атомов вблизи дефекта. Нормальные же смещения направлены преимущественно в сторону от дефекта. Причем их величина оказывается тем больше, чем выше энергия образования соответствующего дефекта. В сверхструктурах  $DO_3$  и  $L2_1$  вектором симметричного сдвига вдоль направления диагонали куба является вектор  $1/2\langle 111 \rangle$ , за исключением векторов полной трансляции. По симметрии рассматриваемых сверхструктур можно прийти к выводу, что в В2 возможно образование двух различных ДУ в каждой из плоскостей зоны  $\langle 111 \rangle$ . Один из них — СДУ соответствует сдвигу на  $1/12\langle 111 \rangle$ , а другой — КДУ — сдвигу на  $2/12\langle 111 \rangle$ . Это отражено на графике (рис. 2). В сверхструктурах  $DO_3$  и  $L2_1$  возможно образование до четырех типов ДУ в каждой из плоскостей зоны  $\langle 111 \rangle$ . Энергии образования СДУ и АФГ во всех рассматриваемых сверхструктурах соответствуют примерно  $200 \text{ мДж/м}^2$ . Энергия же образования КДУ в В2 составляет более  $600 \text{ мДж/м}^2$ , что, в принципе должно приводить к нестабильности этого дефекта и его распаду на СДУ и АФГ, например, путем дислокационной реакции

$$\frac{2}{12}\langle 111 \rangle (H_1 K_1 L_1) \rightarrow \frac{3}{12}\langle 111 \rangle (H_2 K_2 L_2) + \frac{1}{12}\langle -1-1-1 \rangle (H_3 K_3 L_3), \quad (1)$$

где  $H_i K_i L_i$  — индексы Миллера плоскостей зоны  $\langle 111 \rangle$ .

Несколько иная ситуация в сплаве  $Fe_3Al$  со сверхструктурой  $DO_3$ . Здесь КДУ с вектором сдвига  $4/12\langle 111 \rangle$  не соответствует какой-либо минимум на профиле  $\gamma$ -поверхности. А энергия образования КДУ с вектором сдвига  $5/12\langle 111 \rangle$  в несколько раз превышает энергию первой АФГ. Кроме

того, энергия  $A\Phi\Gamma_{II}$  более чем вдвое выше энергии образования  $A\Phi\Gamma_I$ . Поэтому здесь возможны следующие дислокационные реакции:

$$\begin{aligned} \frac{6}{12}\langle 111\rangle(H_1K_1L_1) &\rightarrow \frac{3}{12}\langle 111\rangle(H_2K_2L_2) + \frac{3}{12}\langle 111\rangle(H_3K_3L_3) \\ \frac{5}{12}\langle 111\rangle(H_1K_1L_1) &\rightarrow \frac{3}{12}\langle 111\rangle(H_2K_2L_2) + \frac{3}{12}\langle 111\rangle(H_3K_3L_3) + \\ &+ \frac{1}{12}\langle -1-1-1\rangle(H_4K_4L_4). \end{aligned} \quad (2)$$

В модельном сплаве  $Ni_2AlNb$  сверхструктуры  $L2_1$  маловероятно образование КДУ II и КДУ III. Поэтому возможно расщепление таких ДУ путем дислокационных реакций

$$\begin{aligned} \frac{4}{12}\langle 111\rangle(H_1K_1L_1) &\rightarrow \frac{3}{12}\langle 111\rangle(H_2K_2L_2) + \frac{1}{12}\langle 111\rangle(H_3K_3L_3) \\ \frac{5}{12}\langle 111\rangle(H_1K_1L_1) &\rightarrow \frac{3}{12}\langle 111\rangle(H_2K_2L_2) + \frac{3}{12}\langle 111\rangle(H_3K_3L_3) + \\ &+ \frac{1}{12}\langle -1-1-1\rangle(H_4K_4L_4). \end{aligned} \quad (3)$$

В других плоскостях зоны  $\langle 111\rangle$  профили  $\gamma$ -поверхностей оказываются аналогичными вышеприведенным с небольшими количественными отличиями, что лишний раз доказывает реальность карандашного скольжения в таких сплавах. С помощью профиля  $\gamma$ -поверхности выявлены все возможные сдвиговые ДУ. Стабильность дефекта определяется в результате приведения кристалла в равновесное состояние путем релаксации решетки. Полученные профили  $\gamma$ -поверхностей подтверждают реальность карандашного скольжения.

### Список литературы

- [1] Хирт Дж., Лотте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1992. 600 с.
- [2] *Ymaguchi M., Umakoshi V.* // Elsevier. 1984. V. 147. P. 131.
- [3] *Paidar V., Lejsek L.* // Elsevier. 1984. V. 147. 463 p.
- [4] Баранов М.А., Романенко В.В. // МежВУЗ. сборн., Барнаул: АлтПИ, 1990. С. 72-77.
- [5] Старостенков М.Д., Романенко В.В., Баранов М.А. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. В. 19. С. 69-73.
- [6] Старостенков М.Д., Романенко В.В. // Изв. вузов. Черная металлургия. 1993. № 6. С. 46-48.

Алтайский государственный  
технический университет

Поступило в Редакцию  
16 ноября 1995 г