

01; 05.1

© 1991

ОРИЕНТАЦИОННАЯ АНИЗОТРОПИЯ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В СПЛАВАХ СВЕРХСТРУКТУР В2 И DO_3

М.Д. Старостенков, В.В. Романенко,
М.А. Баранов

На протяжении значительного отрезка времени истории развития современного материаловедения предпринимались многочисленные и неоднократные попытки построения общих теорий прочности и пластичности, внесшие вклад в развитие наших взглядов и представлений относительно данной проблемы [1, 2]. В то же время реальная ситуация в данном разделе науки все еще достаточно сложна и далека от завершения, так как основные „события“ процесса развиваются непосредственно на микроскопическом уровне, где возможны неоднозначные и многообразные варианты их реализации и превращений [3]. Этими факторами объясняется необходимость тщательного изучения и систематики различных этапов и уровней развития процессов деформации в материалах как за счет экспериментальных (в основном посредством наблюдения в колонне электронного микроскопа), так и путем применения моделей и средств вычислительной техники [4]. К последним аспектам непосредственно относится недавно освоенная методика построения G -поверхности [5]. Профиль или G -поверхность строится путем моделирования на атомном уровне с помощью ЭВМ энергетической поверхности сдвига кристалла вдоль плоскости скольжения за счет сканирования при малом приращении вектора трансляции. Профиль или двумерный разрез G -поверхности вдоль какого-либо базисного направления скольжения позволяет оценить величины потенциальных барьеров, которые необходимо преодолеть, чтобы образовать дефект или реализовать микроскопический элемент деформации материала.

В металлах и сплавах на основе ОЦК-решетки развитие скольжения возможно в плоскостях $\{110\}$, $\{211\}$, $\{321\}$, $\{111\}$ [1, 2]. Так как плоскости $\{110\}$, $\{211\}$, $\{321\}$ принадлежат зоне $\langle 111 \rangle$, скольжение может развиваться в любой из них в зависимости от профиля потенциального барьера сдвиговой деформации. При относительных сдвигах частей кристалла вдоль плоскости скольжения на вектор $1/6 \langle 111 \rangle$ или $1/3 \langle 111 \rangle$ в металлах и регулярных твердых растворах образуются дефекты упаковки (ДУ) [3]. В упорядоченных сплавах наряду с ДУ возникают антифазные границы (АФГ) в зоне сдвига на вектор $1/2 \langle 111 \rangle$ или $\langle 100 \rangle$ в зависимости от типа сверхструктуры. Поэтому профиль G -поверхности в упорядоченном сплаве должен состоять из не-

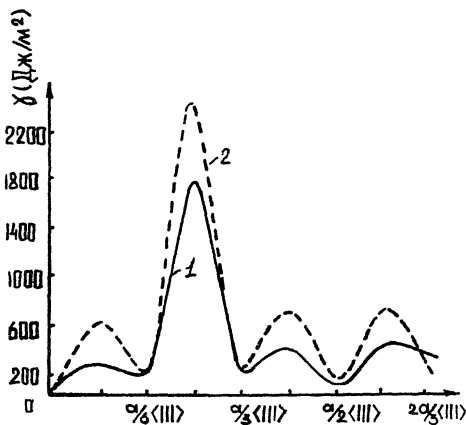


Рис. 1. Профиль G -поверхности в сплавах Fe_3Al (DO_3) (1), $FeAl$ ($B2$) (2) в плоскостях типа $\{110\}$ в направлении $\langle 111 \rangle$.

скольких энергетических минимумов различной глубины в зависимости от типа реализуемого сдвигом дефекта.

На примере сплава $NiAl$ (сверхструктура $B2$) потенциальный профиль G -поверхности рассчитывался в [5], где было показано, что сдвиг $1/6 \langle 111 \rangle$ образует сверхструктурный дефект упаковки (СДУ) [6], сдвиг $1/2 \langle 111 \rangle$ - АФГ, а $1/3 \langle 111 \rangle$ создаст комплексный ДУ (КДУ), включающий СДУ и АФГ.

В настоящей работе на примере сплавов системы $Fe-Al$ построен профиль G -поверхности для всех плоскостей зоны $\langle 111 \rangle$. Интересно сравнение профилей для двух типов "B2" и "DO3" сплавов $FeAl$ и Fe_3Al для выявления конкретных особенностей течения пластической деформации в сверхструктурах.

Расчет выполнялся по методике машинного моделирования; взаимодействия между различными парами атомов в сплаве аппроксимировались наборами потенциальных функций типа Морза, параметры которых описаны согласно методики [6]. Реализована следующая процедура расчета: на ЭВМ в блоке кристалла создается сдвиг его частей на некоторый малый вектор $\vec{c} \langle 111 \rangle$. После чего проводится релаксация в приграничной области кристалла посредством поиска минимума внутренней энергии по атомным смещениям при условии закрепления сдвига по краям расчетного кристаллита. В противном случае сдвиг за счет релаксации полностью исчезает. Фиксировались положения сдвига, равные $1/12, 1/6, 1/4, 1/3, 5/12, 1/2, 7/12, 2/3$ доли вектора трансляции $\langle 111 \rangle$.

На рисунках (1-3) приведены энергетические профили G -поверхностей для плоскостей $\{110\}, \{211\}, \{321\}$, рассчитанные при относительном сдвиге частей кристалла вдоль $\langle 111 \rangle$. Очевидно, что для ОЦК-металлов или регулярных твердых растворов энерге-

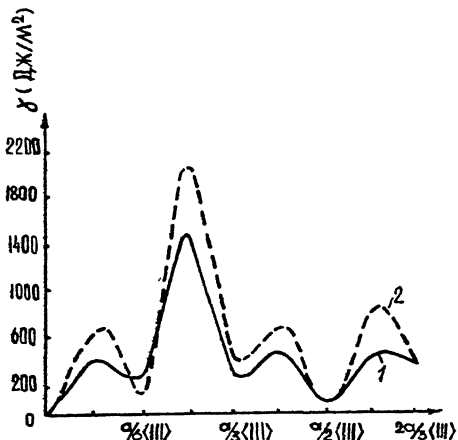


Рис. 2. Профиль G -поверхности в сплавах Fe_3Al (DO_3) (1), $FeAl$ (B2) (2) в плоскостях типа $\{211\}$ в направлении $\langle 111 \rangle$.

тический профиль должен быть относительно прост и включать минимумы энергий при сдвигах, кратных $1/6 \langle 111 \rangle$ и равные по величине, а профиль G -поверхности представлял бы себе подобие синусоиды. Значительно более сложная картина реализуется в упорядоченных сплавах [5]. Прежде всего при сдвиге на $1/6 \langle 111 \rangle$ образуется СДУ. Сдвиг на $1/3 \langle 111 \rangle$ соответствует КДУ, состоящему из СДУ и АФГ. Смещения на $1/2 \langle 111 \rangle$ соответствуют образованию сдвиговой АФГ. Энергия образования КДУ равна сумме энергий СДУ и АФГ. Данные расчетов свидетельствуют, что его энергия за счет эффектов взаимодействия между планарными дефектами меньше простой суммы энергий перечисленной выше пары дефектов. В значительной степени подобный эффект проявляется в плоскости $\{321\}$. Сравнение сверхструктур В2 и DO_3 показывает, что потенциальные барьеры максимальны в сверхструктуре В2. Максимум соответствует сдвигу на $1/4 \langle 111 \rangle$. Практически, для всех ориентаций энергия образования СДУ минимальна в сверхструктуре В2. Здесь можно предположить, что если в сверхструктуре DO_3 образуется СДУ, то за счет термоактивации возможно образование на его основе локальной прослойки сверхструктуры В2. В случае АФГ подобную тенденцию можно допустить для ориентаций $\{321\}$ (переход $DO - B2$), $\{110\}$ (переход $B2 - DO_3$). Различия сверхструктур в энергии образования КДУ незначительные, что можно интерпретировать отсутствием диффузной перестройки сверхструктуры на нем.

Замечания относительно стабильности сверхструктур по отношению к сдвигу. По положению первого потенциального барьера видно, что максимальный его уровень характерен для сверхструктуры В2. Причем в ориентациях $\{110\}$, $\{211\}$ их величины оказываются близкими. Более высокий уровень барьера в плоскостях $\{321\}$.

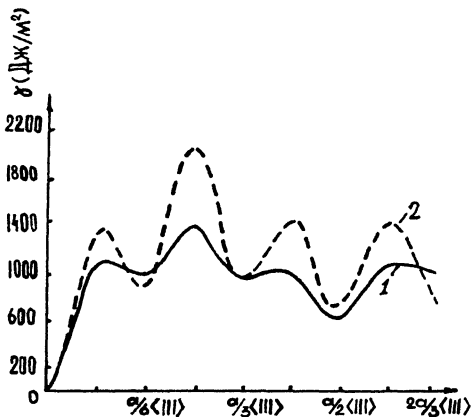


Рис. 3. Профиль \mathcal{G} -поверхности в сплавах $Fe_3Al(DO_3)$ (1), $FeAl$ (B2) (2) в плоскостях типа $\{321\}$ в направлении $\langle 111 \rangle$.

То есть на первом этапе предпочтительно возникновение деформаций в плоскостях $\{110\}$, $\{211\}$. На втором этапе сдвига при векторе трансляции, большем чем $1/6 \langle 111 \rangle$, относительная величина потенциального барьера оказывается максимальной. Для сверхструктуры DO_3 барьер максимален в плоскости $\{110\}$, то есть на этом этапе может смениться пара предпочтительных плоскостей сдвига на $\{321\}$ и $\{211\}$. В сверхструктуре B2 подобное различие менее заметно.

Третий этап характеризуется относительно малой величиной потенциального барьера, примерно: равного для всех ориентаций в сверхструктуре B2 и максимального в плоскостях $\{321\}$ для сверхструктуры DO_3 . То есть в сверхструктуре DO_3 вкось следует смена пары предпочтительных на сдвиг плоскостей.

Несколько слов о характере локальных смещений вблизи \mathcal{G} -поверхности. Область атомных смещений или релаксаций максимальна в системе скольжения $\{321\}$ и простирается в глубь границы на 10–12 плоскостей. Минимальна в плоскости $\{110\}$ — 2–3 плоскости. Характер деформации меняется с переходом от одной системы скольжения к другой в зависимости от величины сдвига. В системе $\{110\}$ смещения атомов преимущественно направлены вдоль $\langle 110 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$, что приводит к расщеплению плоскостей на две (сверхструктура B2) или четыре (сверхструктура DO_3) подплоскости. Наблюдаются внутриплоскостные смещения атомных рядов вблизи \mathcal{G} -поверхности, которые можно проинтерпретировать в терминах локальной деформации сжатия и растяжения, наличие дополнительного стабилизирующего сдвига $\varphi \langle 110 \rangle$. Более значительные смещения развиваются в плоскостях $\{211\}$. Здесь смещения атомов так же двумерны в направлениях $\langle 111 \rangle$ и $\langle 211 \rangle$.

(аналогично описанным выше для плоскостей $\{110\}$). В плоскостях $\{321\}$ отмечается более сложная картина смещений атомов на G -поверхности. Причем смещения трехмерны в направлениях $\langle 321 \rangle$, $\langle -111 \rangle$, $\langle 1-21 \rangle$.

В целом можно отметить, что, судя по характеру локальных деформаций, потеря симметрии максимальна в плоскостях $\{321\}$, т.е. дефекты и частичные дислокации в данном семействе плоскостей могут выступать как относительно значительные элементы, характеризующие области деформационного упрочнения упорядоченных сплавов. Аномалии локальных смещений максимальны в сверхструктуре DO_3 . Полученные результаты свидетельствуют, что модели линейной теории упругости не работают при описании планарных дефектов в упорядоченных сплавах и интерпретируют предпочтительную возможность карандашного скольжения дислокаций в сверхструктуре DO_3 .

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Х и р т Дж., Л о т е И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат. 1972. 599 с.
- [2] Ф р и д е л ь Дж. Дислокации. М. 1967. 643 с.
- [3] P a i d a z V., P o r e D.P., V i t e k V. // Acta Met. 1984. N 3. P. 435-448.
- [4] Моделирование на ЭВМ радиационных дефектов в металлах / Под ред. Ю.В. Трушина. Л.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 1990. 217 с.
- [5] С т а р о с т е н к о в М.Д., Б а р а н о в М.А. Исследование свойств дефектов упаковки ориентации $\{321\}$ в сплавах сверхструктуры $B2$ // Изв. вуз. Черная металлургия. 1990. № 4. С. 54-55.
- [6] С т а р о с т е н к о в М.Д., Г о р л о в Н.В., С т а р о с т е н к о в а О.Х. Трубки антифазных границ в упорядоченном сплаве со сверхструктурой $L1_2$ // ФММ. 1990. № 4. С. 183-190.

Поступило в Редакцию
20 августа 1991 г.