

05;12

## Моделирование энергетического профиля сдвига в сплавах со сверхструктурой D1a

© М.А. Баранов, А.Г. Никифоров, М.Д. Старостенков

Алтайский государственный технический университет

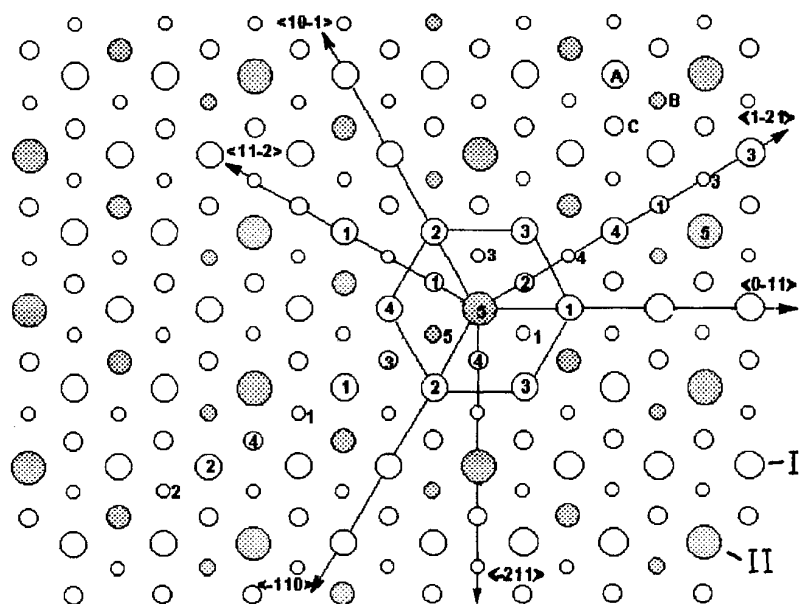
Поступило в Редакцию 9 декабря 1997 г.

Получен профиль энергетической поверхности сдвига в главной системе скольжения кристалла сплава Ni<sub>4</sub>Mo. Выявлены все возможные метастабильные плоские дефекты. Определены механизмы деформационного упрочнения, характерные для данной сверхструктуры.

Известно, что энергетика плоских дефектов сдвигового типа во многом определяет протекание пластической деформации в кристаллах и их последующее упрочнение [1]. В сплавах высокосимметричных сверхструктур описание дефектов сдвигового типа оказывается наиболее простым [2]. Между тем многие сплавы со специфическими физико-механическими свойствами кристаллизуются в низкосимметричные сверхструктуры. Примером такого сплава является Ni<sub>4</sub>Mo со сверхструктурой D1a. Экспериментальное исследование свойств фазы D1a выполнено [3], а ее кристаллогеометрическое описание в [4]. Сверхструктура D1a формируется на основе ГЦК решетки узлов и представляется в виде пяти подрешеток, четыре из которых заполнены атомами сорта A, а одна — атомами сорта B. Координаты узлов одной подрешетки находятся как целочисленные линейные комбинации векторов объемно-центрированного базиса

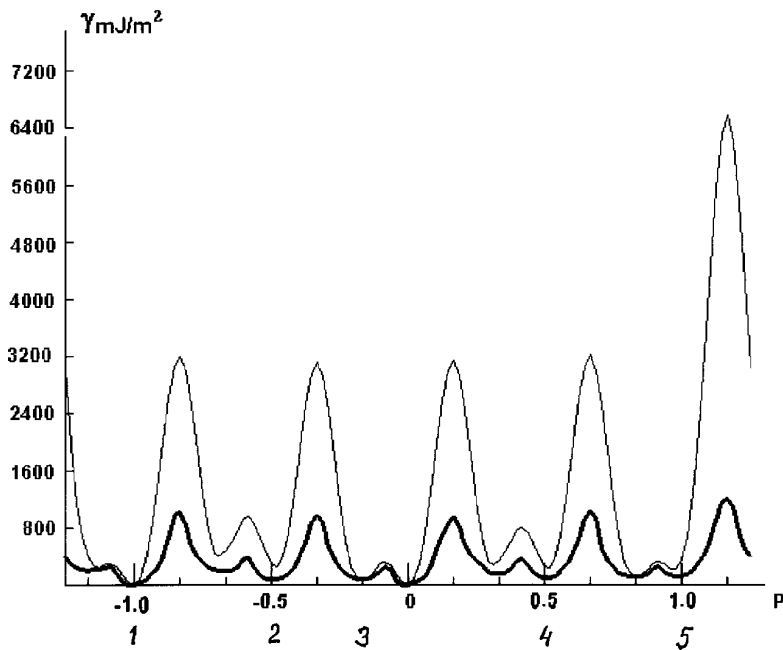
$$\begin{pmatrix} \mathbf{e}'_1 \\ \mathbf{e}'_2 \\ \mathbf{e}'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/2 & 1/2 & 0 \\ -1/2 & 3/2 & 0 \\ 1/2 & 1 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_1 \\ \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}_3 \end{pmatrix},$$

где  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$  — базисные векторы, направленные вдоль ребер элементарного ГЦ куба. Скольжение в D1a, как и для всех сплавов с ГЦК решеткой узлов, осуществляется преимущественно в плоскостях типа (111) в ГЦК базисе. Проекция кристалла сплава Ni<sub>4</sub>Mo на плоскость (111) приводится на рис. 1. Антифазные границы (АФГ) в плоскости



**Рис. 1.** Проекция кристалла  $\text{Ni}_4\text{Mo}$  на плоскость  $(111)$ . *I* — Ni, *II* — Mo. A, B, C — положения проекций слоев, 1–5 — номера подрешеток.

$(111)$  образуются путем сдвига слоя A и всех вышележащих слоев на векторы типа  $1/2\langle 110 \rangle$ , дефекты упаковки (ДУ) — путем сдвига слоя A в положение слоя B на векторы типа  $1/6\langle 211 \rangle$  или  $1/3\langle 211 \rangle$ . В результате возможно образование четырех типов АФГ и пяти ДУ. Обозначим их АФГ1–АФГ4 и ДУ1–ДУ5 в соответствии с номером подрешетки, на которую проектируются атомы молибдена, занимающие пятую подрешетку из слоя A. При моделировании дефекта сдвига предполагалось, что взаимодействия между атомами являются парными, центральными и описываются функцией Морза. После выполнения начального сдвига и закрепления краев кристаллического блока проводился поиск вариационным методом равновесной конфигурации дефекта и энергии его образования —  $\gamma$ . Энергии образования этих дефектов и векторы кратчайшего сдвига из положения идеального кристалла приведены в таблице.



**Рис. 2.** Зависимость энергии образования плоского дефекта, полученного сдвигом полукристалла на вектор  $p\langle 1-21 \rangle$  в плоскости (111): 1 — ДУ2 АФГ2, 2 — ДУ1 АФГ1, 3 — ДУ5, 4 — ДУ4 АФГ4, 5 — ДУ3 АФГ3.

Полученные значения оказываются близкими к оценкам, проведенным в [3]: для АФГ  $\gamma = 40 - 60 \text{ mJ/m}^2$ . Отличие энергии образования АФГ2 от нуля ( $1.4 \text{ mJ/m}^2$ ) обусловлено только тетрагональностью решетки и является кристаллогеометрическим эффектом. Можно предположить существование в сплаве каркаса из АФГ, индифферентных к распаду, но являющихся препятствием для движения дислокаций в пересекающихся плоскостях.

Поскольку ДУ2 и ДУ4 могут быть получены сдвигом на кратчайший вектор только из конфигурации соответствующей АФГ, то их следует отнести к комплексным; ДУ1, ДУ3, ДУ5 — сверхструктурные [2]. Очевидно, что все плоские дефекты, приведенные в таблице, могут быть получены сдвигом в одном из направлений  $\langle 1-21 \rangle$  или  $\langle 11-2 \rangle$ .

Дефект	Вектор сдвига	$\gamma, \text{mJ/m}^2$	Дефект	Вектор сдвига	$\gamma, \text{mJ/m}^2$
АФГ1	$1/2\langle 0-11 \rangle$	71	ДУ1	$1/6\langle -1-12 \rangle$	195
АФГ2	$1/2\langle 10-1 \rangle$	1.4	ДУ2	$1/3\langle 11-2 \rangle$	198
АФГ3	$1/2\langle 1-10 \rangle$	114	ДУ3	$1/6\langle 2-1-1 \rangle$	119
АФГ4	$1/2\langle 01-1 \rangle$	90	ДУ4	$1/6\langle 1-21 \rangle$	151
			ДУ5	$1/6\langle -12-1 \rangle$	60

Профиль  $\gamma$ -поверхности для направления  $\langle 1-21 \rangle$  приводится на рис. 2. Тонкая кривая описывает стартовую конфигурацию дефекта, жирная — равновесную. Положения минимумов, соответствующих АФГ и ДУ в их стартовой конфигурации, слегка сдвинуты относительно предсказываемых моделью жестких сфер, что объясняется наличием дальнего порядка в сплаве. Переход к состояниям метастабильного равновесия исправляет данную ситуацию. Атомные конфигурации дефектов, приведенных в таблице, визуализировались. Характер микродеформаций вблизи дефекта оказывается таким, что в целом не удается найти плоскость, в которой были бы расположены векторы смещений всех атомов, как это имеет место для высокосимметричных сверхструктур.

Таким образом, в результате моделирования  $\gamma$ -поверхности в главных плоскостях скольжения сверхструктуры D1a выявлена возможность существования пяти типов ДУ и четырех типов АФГ. Эффект твердорастворного упрочнения может быть достигнут как за счет присутствия в кристалле протяженных АФГ, так и за счет сложного характера микродеформаций вблизи стабильных плоских дефектов.

## Список литературы

- [1] Хирт Дж., Лотте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
- [2] Новичихина Т.И., Баранов М.А., Старостенков М.Д. // Письма в ЖТФ. Т. 22. В. 5. 1996. С. 81–85.
- [3] Носова Г.И. Автореф. дис. . . . докт. физ.-мат. наук. М.: ЦНИИЧМ, 1981. 36 с.
- [4] Старостенков М.Д., Волкова С.М., Герман В.Г. Барнаул: Алт. политехн. ин-т, 1992. 40 с. Деп. в ВИНТИ 04.02.92.