

01;05

Компьютерное моделирование хрупкого разрушения интерметаллида Ti_3Al

© Л.Е. Карькина, Л.И. Яковенкова, М.Я. Рабовская

Институт физики металлов УрО РАН,
620219 Екатеринбург, Россия
e-mail: yakovenkova@imp.uran.ru

(Поступило в Редакцию 12 апреля 2005 г.)

Методом молекулярной динамики с использованием N -частичных потенциалов межатомного взаимодействия для Ti_3Al вычислены энергии декогезии и энергии нестабильных дефектов упаковки для всех экспериментально наблюдаемых плоскостей раскрытия трещин и систем скольжения дислокаций. В модели Райса–Томпсона и Келли вычислены значения безразмерного параметра, характеризующего меру хрупкого поведения материала для плоскостей базиса, призмы и пирамиды. Показано, что характер разрушения Ti_3Al обусловлен сравнительно низкими значениями энергии декогезии, что приводит к легкому раскрытию трещин, и высокими значениями энергии нестабильных дефектов упаковки, препятствующих формированию пластической зоны и релаксации напряжений в ее вершине.

PACS: 02.70.-с, 62.20.Mk

Введение

Ti_3Al со структурой $D0_{19}$ соответствует α_2 -фазе и является составляющей многих интерметаллидов, используемых в качестве высокотемпературных сплавов. Однако, подобно многим интерметаллическим соединениям, Ti_3Al обладает низкой пластичностью и прочностью при комнатной температуре, что препятствует активному практическому применению в качестве жаропрочных материалов.

Изучение монокристаллического Ti_3Al обнаруживает сильную ориентационную зависимость прочностных и пластических свойств. Деформация монокристаллов, ориентированных на призматическое скольжение, достигает $\varepsilon \sim 250\%$, тогда как при базисном и пирамидальном скольжении образец разрушается хрупко, если $\varepsilon \leq 1-3\%$ [1–4]. К настоящему моменту накоплен большой объем экспериментальных данных о системах скольжения, в которых осуществляется деформация как монокристаллов [1,2,5,6], так и поликристаллов [7] Ti_3Al . Установлено, что наиболее легкой модой деформации является призматическое скольжение $1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}00\}$. В плоскости базиса (0001) деформация также осуществляется a -сверхдислокациями с вектором Бюргерса $1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Предел текучести в плоскости базиса $\sigma_y \sim 250$, в плоскости призмы — $\sigma_y \sim 150-200$ МПа. Для монокристаллов с ориентацией оси деформирования вблизи направления [0001], когда сдвиговые напряжения в плоскостях базиса и призмы к нулю, действующими оказываются пирамидальные $\{1\bar{1}21\}$ и $\{20\bar{2}1\}$ системы скольжения $2c + a$ сверхдислокаций с векторами Бюргерса $1/3\langle 1\bar{1}26 \rangle$. Предел текучести при комнатной температуре при пирамидальном скольжении составляет $\sigma_y \sim 1300$ МПа.

К настоящему времени накоплен достаточно большой объем экспериментальных данных о типах наблюдаемых плоскостей, по которым происходит разрушение сколом в Ti_3Al [3,4,8–11]. При хрупком разрушении монокристаллов Ti_3Al , ориентированных для пирамидального и базисного скольжения, обнаружены $\{10\bar{1}2\}$, $\{1\bar{1}23\}$, $\{10\bar{1}1\}$, (0001) плоскости скола. Одной из наиболее интересных и нерешенных проблем является механизм хрупкого разрушения в Ti_3Al . В большинстве случаев распространение трещины определяется соотношением между поверхностной энергией раскрываемой трещины и теми релаксационными процессами, которые проходят в области вблизи ее вершины.

В настоящей работе с использованием модели Райса–Томпсона [12] и Келли и др. [13] изучено соотношение между склонностью материала к сколу и пластической релаксацией, являющееся источником понимания причин хрупкого разрушения Ti_3Al монокристаллов. С использованием метода компьютерного моделирования получены поверхностная энергия Гриффитса, определяющая способность трещины к раскрытию и энергии нестабильных дефектов упаковки, определяющие энергетические барьеры, которые нужно преодолеть в процессе дислокационного скольжения. Оценены критерии хрупкого разрушения Ti_3Al с учетом экспериментально наблюдаемых типов плоскостей скола и систем скольжения дислокаций.

Методика расчета

Компьютерное моделирование поверхностной энергии Гриффитса и энергии нестабильных дефектов упаковки проводилось с помощью методов молекулярной динамики с использованием N -частичных потенциалов межатомного взаимодействия для Ti_3Al , полученных мето-

дом погруженного атома [14]. Вычисленные с применением этих потенциалов значения модулей упругости, энергий поверхностных дефектов в плоскостях базиса (0001), призмы $\{1\bar{1}00\}$ и пирамиды $\{\bar{1}\bar{1}21\}$ и $\{20\bar{2}1\}$ совпадают с экспериментальными данными.

Энергия декогезии как функция расстояния между атомными плоскостями вычислялась для экспериментально наблюдаемых плоскостей скола $\{10\bar{1}2\}$, $\{\bar{1}\bar{1}23\}$, $\{10\bar{1}1\}$, (0001), для других плотноупакованных плоскостей призмы $\{1\bar{1}00\}$, $\{\bar{1}\bar{1}20\}$ и пирамиды $\{\bar{1}\bar{1}21\}$ и $\{20\bar{2}1\}$. В Ti_3Al наблюдается многообразие систем скольжения. В зависимости от ориентации оси нагружения экспериментально установлено, что деформация может осуществляться в плоскостях базиса, призмы $\{1\bar{1}00\}$ и пирамиды $\{\bar{1}\bar{1}21\}$, $\{20\bar{2}1\}$. Мы исследовали зависимость энергии обобщенного дефекта упаковки (ДУ) от величины сдвига для экспериментально наблюдаемых систем скольжения. Энергия обобщенного ДУ вычислялась в плоскости базиса и призмы в направлении $(11\bar{2}0)$, в плоскостях пирамиды — вдоль направления $(\bar{1}\bar{1}26)$.

При расчетах по методу молекулярной динамики модельный кристаллит имел форму параллелепипеда, включающего атомы Ti и Al, упорядоченные в соответствии со сверхструктурой $D0_{19}$. Одна из плоскостей модельного кристаллита выбиралась параллельной плоскости рассматриваемого планарного дефекта. В плоскости дефекта определялись периодические граничные условия. При вычислении энергии декогезии верхняя половина кристаллита сдвигалась вдоль нормали к выбранной плоскости до образования двух свободных поверхностей. Для определения энергии обобщенного ДУ верхняя часть кристаллита сдвигалась относительно нижней вдоль вектора, совпадающего с вектором Бюргера сверхдислокаций в рассматриваемой плоскости. Вектор смещения \mathbf{f} увеличивался с шагом до значения, совпадающего с трансляцией решетки вдоль выбранного направления.

Соотношение между способностью трещины к раскрытию и затуплению оценивалось в модели Райса—Томпсона [12] и Келли и др. [13]. В этой модели рассматривается трещина нормального отрыва I типа в присутствии растягивающих напряжений, перпендикулярных плоскости трещины. Предложенный в [15] безразмерный параметр q , характеризующий меру хрупкости, имеет вид

$$q = G_d/G_c = \frac{\gamma_{us}[1 + (1 - \nu)] \operatorname{tg}^2 \varphi}{2\gamma_c f^2(\theta)}, \quad (1)$$

где $G_c = 2\gamma_c$ — энергия декогезии,

$$G_d = \frac{\gamma_{us}[1 + (1 - \nu)] \operatorname{tg}^2 \varphi}{f^2(\theta)} \quad (2)$$

— условие зарождения дислокаций для трещины I типа, θ — угол между плоскостью трещины и плоскостью

скольжения дислокации,

$$f(\theta) = \cos^2 \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}, \quad (3)$$

где ν — коэффициент Пуассона, φ — угол между вектором Бюргера и линией пересечения плоскости скольжения дислокации и плоскости трещины, γ_{us} — энергия нестабильного ДУ. Значение q вычислялось для одного из выбранных типов плоскостей скола и всех возможных систем скольжения дислокаций в Ti_3Al .

Результаты компьютерного моделирования

Для сверхструктуры $D0_{19}$ существует три различных сечения в плоскостях $\{1\bar{1}00\}$, отличающихся расположением атомов двух сортов и расстоянием между плоскостями, ближайшими к плоскости разреза кристаллита (рис. 1). При моделировании декогезии это обстоятельство необходимо учитывать. В [16] было показано, что эти сечения отличаются также величиной энергии антифазной границы (АФГ) и формой γ — поверхности. Энергия АФГ в плоскости пирамиды II типа (сечение II на рис. 1) равна 318 mJ/m^2 , тогда как в плоскостях I типа (сечения I и I' на рис. 1) — 6 mJ/m^2 . На рис. 2 представлена энергия декогезии G_c в зависимости от расстояния между атомными плоскостями u для плоскостей базиса, призмы и пирамиды. Энергия декогезии была вычислена для всех трех сечений плоскости призмы $\{1\bar{1}00\}$, результаты расчетов представлены в табл. 1.

На рис. 2, а приведена кривая, соответствующая плоскости призмы II типа и отвечающая наиболее низкому значению поверхностной энергии γ_c и энергии декогезии G_c . На этом же рисунке представлены кривые для

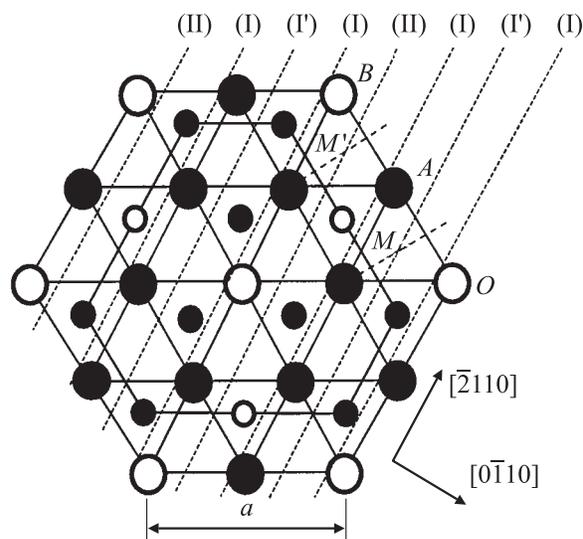


Рис. 1. Проекция на плоскость базиса элементарной ячейки сверхструктуры $D0_{19}$ (\bullet — Ti, \circ — Al). Показаны сечения I, I', II плоскости призмы $(0\bar{1}10)$.

плоскостей базиса (0001) и призмы $\{\bar{1}\bar{1}20\}$. На рис. 2, *b* приведены кривые зависимости $G_c(u)$ для плоскостей пирамиды $\{10\bar{1}2\}$, $\{\bar{1}\bar{1}23\}$, $\{10\bar{1}1\}$, которые чаще всего являются плоскостями скола. Значения поверхностных энергий для этих плоскостей, а также для других исследованных нами плоскостей пирамиды приведены в табл. 1. Точками на рис. 2, *a*, *b* показаны результаты молекулярно-динамического моделирования, сплошные кривые — универсальное соотношение для энергии связи [17], используемое для аппроксимации рассчитанных значений

$$E_{dh} = G_c \{1 - (1 + x) \exp(-x)\}, \quad x = u/\lambda, \quad (4)$$

где $G_c = 2\gamma_c$ — асимптотическое значение идеальной энергии декогезии; λ — масштабный параметр. Полученные значения параметров представлены в табл. 1.

Анализ результатов компьютерного моделирования (табл. 1, рис. 2) показал, что достаточно низкие значения поверхностной энергии на разрыв $\gamma_c \sim 1050\text{--}1150 \text{ мДж/м}^2$ получены для плоскостей базиса, призмы $\{1\bar{1}00\}$ I' и II типа и плоскости пирамиды $\{\bar{1}\bar{1}21\}$. В этих плоскостях раскрытие трещин может происходить достаточно легко. Самые высокие значения $\gamma_c \sim 1550\text{--}1580 \text{ мДж/м}^2$ получены для плоскости приз-

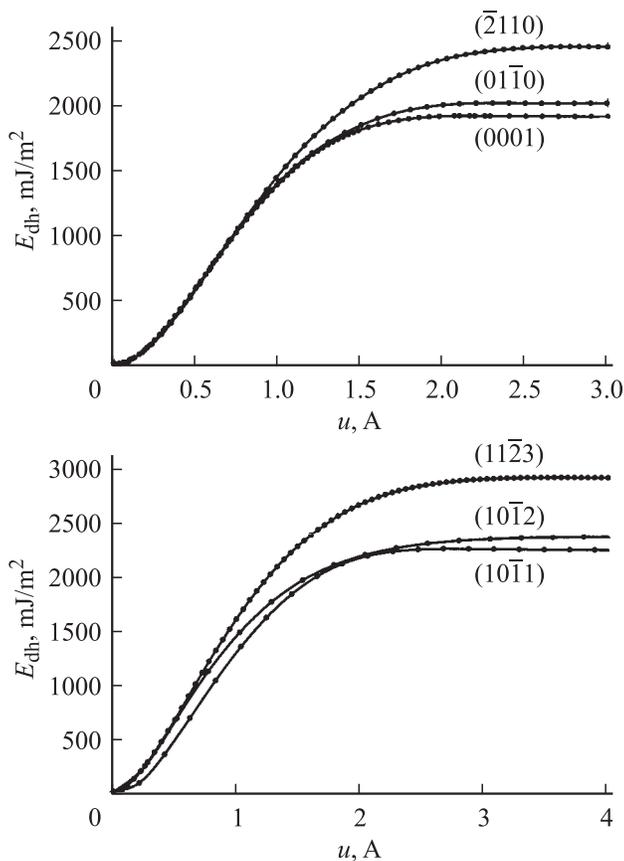


Рис. 2. Зависимость энергии декогезии E_{dh} от расстояния между атомными плоскостями (0001), (0110), (2110) — (а) и (1011), (1012), (1123) — (б).

Таблица 1. Энергия декогезии G_c и энергия поверхностных дефектов γ_c для рассмотренных плоскостей раскрытия трещин в Ti_3Al

Плоскость трещины	$G_c, \text{ мДж/м}^2$	$\gamma_c, \text{ мДж/м}^2$
(1100) II	2062	1031
(2021) I	2120	1060
(0001)	2117	1058
(1100) I'	2192	1097
(1011) I	2274	1137
(1012)	2401	1200
(1011) II	2479	1239
(1120)	2484	1242
(1121)	2673	1336
(2021) II	3112	1557
(1123)	3122	1561
(1100) I	3171	1585

Таблица 2. Энергии нестабильных дефектов упаковки γ_{us} для возможных систем скольжения полных и расщепленных дислокаций в Ti_3Al

Система скольжения	$\gamma_{us}, \text{ мДж/м}^2$
$1/6\langle\bar{1}100\rangle(0001)$	409
$1/12\langle\bar{1}\bar{1}2x\rangle\{\bar{1}\bar{1}00\} I'$	643
$1/6\langle\bar{1}\bar{1}20\rangle\{\bar{1}\bar{1}00\} I'$	655
$1/6\langle\bar{1}\bar{1}20\rangle(0001)$	957
$1/6\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle\{2021\}$	2824
$1/6\langle\bar{1}\bar{1}26\rangle\{\bar{1}\bar{1}21\}$	3608

мы $\{1\bar{1}00\}$ I типа, плоскости пирамиды $\{2021\}$ II типа и плоскости пирамиды $\{\bar{1}\bar{1}23\}$. В этих плоскостях процесс раскрытия трещин должен происходить наиболее трудно.

Релаксационные характеристики трещин оценивались по величине энергии нестабильных дефектов упаковки γ_{us} , характеризующих способность к скольжению при сдвиге одной части кристалла относительно другой. Значения энергий нестабильных дефектов упаковки в изученных плоскостях представлены в табл. 2.

На рис. 3, *a* показана зависимость энергии обобщенного дефекта упаковки в плоскости базиса от величины сдвига вдоль направления $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, отвечающей деформации скольжением в плоскости базиса *a*-сверхдислокаций с вектором Бюргерса $1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$, расщепленной на две сверхчастичные дислокации, соединенные полосой АФГ

$$1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle = 1/6\langle 11\bar{2}0 \rangle + \text{APB} + 1/6\langle 11\bar{2}0 \rangle. \quad (5)$$

Сдвиг *OA* (рис. 3, *a*) характеризует антифазную границу, *OB* соответствует полной трансляции. В этом случае энергия нестабильного дефекта упаковки $\gamma_{us} = 957 \text{ мДж/м}^2$ отвечает значению энергии обобщенного дефекта упаковки в точке максимума кривой $E_{dh}(u)$.

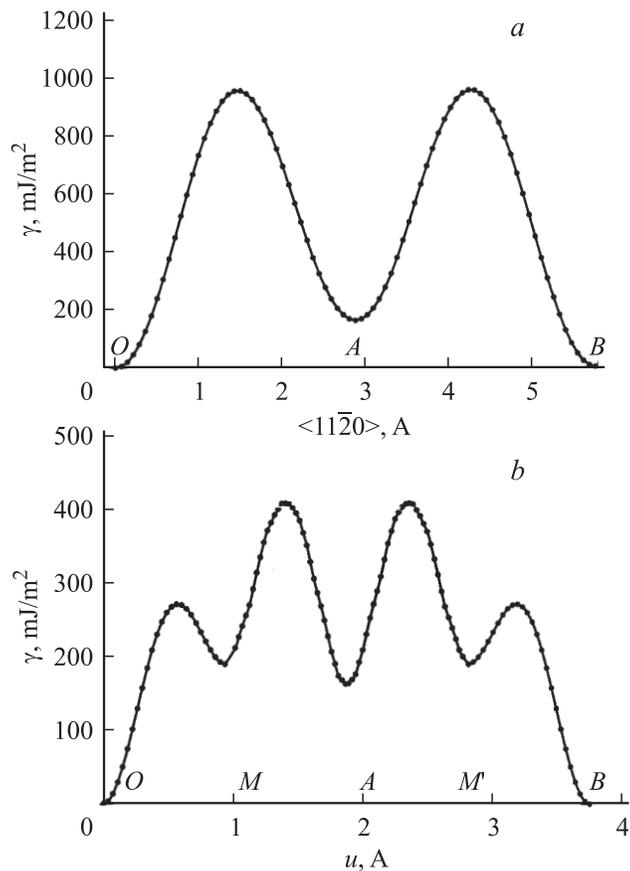


Рис. 3. Зависимость энергии обобщенного дефекта упаковки от величины сдвига вдоль направления $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ (a) и $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ (b) в плоскости базиса.

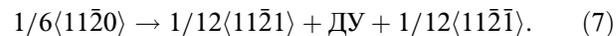
Энергия сверхструктурного дефекта упаковки в Ti_3Al равна $\gamma_{csf} = 197 \text{ mJ/m}^2$ [12]. Соответствующие этой величине значения ширины расщепления сверхчастичной дислокации $1/6\langle 11\bar{2}0 \rangle$ на частичные дислокации Шокли

$$1/6\langle 11\bar{2}0 \rangle = 1/6\langle 10\bar{1}0 \rangle + \text{CSF} + 1/6\langle 01\bar{1}0 \rangle \quad (6)$$

составляют $d \sim (1.9-3.5)a$ при изменении ориентации дислокации от винтовой к краевой. Ширина расщепления не слишком велика, но больше радиуса ядра дислокации, поэтому сдвиг в плоскости базиса будет осуществляться последовательным смещением на векторы, равные $1/6\langle 01\bar{1}0 \rangle$, вдоль траектории $OMAM'B$ (см. рис. 1). Зависимость энергии обобщенного дефекта упаковки от вектора сдвига для этого случая показана на рис. 3, b. Энергия нестабильного дефекта упаковки равна $\gamma_{us} = 410 \text{ mJ/m}^2$, что несколько ниже, чем при движении нерасщепленной сверхчастичной дислокации.

Анализ распределения смещений в области ядра сверхчастичной $1/6\langle 11\bar{2}0 \rangle$ дислокации в плоскости призмы показал [18], что дислокация является не расщепленной, поэтому в плоскостях призмы $\{1\bar{1}00\}$ рассмотрена зависимость $\gamma(u)$ при смещении вдоль направления $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ (рис. 4, a). Кривые на рис. 4, a отвечают

различным сечениям (I, I' и II типа) в плоскости призмы. Для плоскости призмы I' типа получено самое низкое значение энергии нестабильного дефекта упаковки $\gamma_{us} = 655 \text{ mJ/m}^2$, что соответствует наиболее легкому скольжению в этой плоскости. Результаты компьютерного моделирования показали [16,17], что на γ -поверхности в плоскости призмы существует область сдвигов, отвечающая сравнительно низким значениям энергии дефекта упаковки. Для плоскости призмы I' типа это соответствует расщеплению сверхчастичной $1/6\langle 11\bar{2}0 \rangle$ дислокации в соответствии с реакцией [19]



Как следует из результатов компьютерного моделирования, ширина такого расщепления будет меньше радиуса ядра сверхчастичной дислокации. Однако можно ожидать, что, например, при легировании или отходе от стехиометрии, энергия обобщенного дефекта упаковки будет понижаться, и расщепление, в соответствии с реакцией (7), будет реализовано. На рис. 4, b показана зависимость энергии обобщенного дефекта упаковки от величины сдвига вдоль траектории $OFAB$, где век-

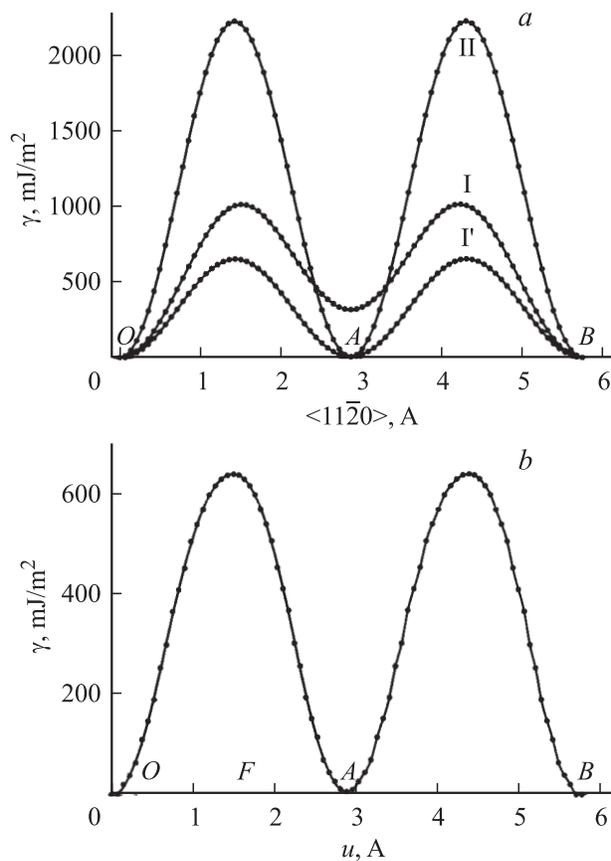


Рис. 4. Зависимость энергии обобщенного дефекта упаковки от величины сдвига вдоль направления $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ в плоскости призмы (a) и $\langle 11\bar{2}1 \rangle$ в плоскости призмы I' типа (b).

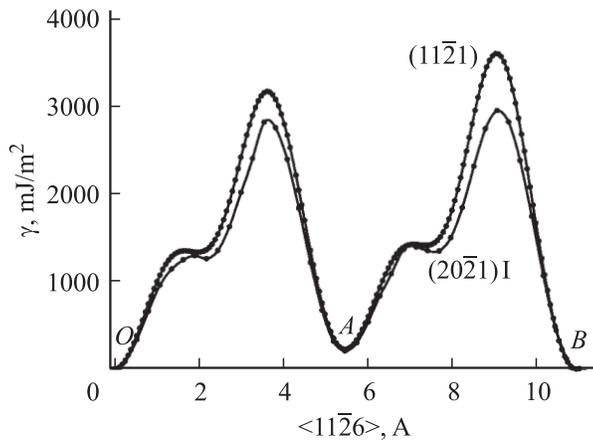


Рис. 5. Зависимость энергии обобщенного дефекта упаковки от величины сдвига вдоль направления $\langle 11\bar{2}6 \rangle$ в плоскостях пирамиды $\{20\bar{2}1\}$ I типа и $\{1\bar{1}21\}$.

тор $\mathbf{OF} = 1/12\langle 11\bar{2}1 \rangle$, $\mathbf{OA} = 1/6\langle 11\bar{2}0 \rangle$ отвечает АФГ, $\mathbf{OB} = 1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ соответствует трансляции.

Существенно более высокое значение γ_{us} получено для плоскостей пирамиды $\{20\bar{2}1\}$ и $\{1\bar{1}21\}$ при сдвиге вдоль направления $\langle 1\bar{1}26 \rangle$ (рис. 5). Для плоскости пирамиды $\{20\bar{2}1\}$ II типа значения γ_{us} оказались очень высокими, и на рис. 5 соответствующая кривая $\gamma(u)$ не приведена. Значения $\gamma_{us} = 2700$ для плоскости $\{20\bar{2}1\}$ и $\gamma_{us} = 3608$ мДж/м² для плоскости $\{1\bar{1}21\}$ приблизительно в 5–7 раз выше, чем в плоскостях базиса и призмы, что коррелирует с соотношением между значениями предела текучести в этих плоскостях.

Ориентационная зависимость параметра разрушения

Безразмерный параметр q , характеризующий меру хрупкости, вычислялся для одной из выбранных плоскостей скола, представленных в табл. 1, и всех возможных систем скольжения дислокаций в Ti_3Al . В табл. 3 представлены наибольшие значения q , при которых наиболее полно происходит релаксация напряжений в вершине трещины при испускании сверхчастичных $a/2$ -дислокаций с вектором Бюргера $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ в плоскостях базиса и призмы и $c + a/2$ -дислокаций с вектором Бюргера $1/6\langle 2\bar{1}\bar{1}6 \rangle$ в плоскостях пирамиды. Самые высокие значения q получены для плоскостей скола $(10\bar{1}2)$ и (0001) (см. две последние строки табл. 3). Релаксация напряжений для этих плоскостей невозможна в плоскостях базиса и призмы, где получены наиболее низкие значения γ_{us} . Для плоскости скола (0001) угол $\theta = 0$ и $f(\theta) = 0$ (см. (3)) при образовании пластической зоны в плоскости базиса. При образовании пластической зоны в плоскостях призмы линии пересечения последних с плоскостью скола совпадают с направлением $\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$, параллельным вектору Бюргера $a/2$ -сверхдислокаций, т.е. $\varphi = 0$ (3) и релаксация напряжений в плоскостях

призмы невозможна. Аналогичная ситуация наблюдается для плоскости скола $(10\bar{1}2)$. Образование пластической зоны в этих плоскостях возможно только в результате пирамидального скольжения $1/6\langle 11\bar{2}6 \rangle \{20\bar{2}1\}$. Из табл. 2 видно, что значения γ_{us} в плоскостях пирамиды значительно выше, чем в плоскостях базиса и призмы. Это и определяет высокие значения q , полученные для плоскостей скола $(10\bar{1}2)$ и (0001) .

Наиболее низкое значение q получено для плоскости скола $(1\bar{1}00)$ I. Для этой плоскости в результате молекулярно-динамического моделирования определено самое высокое значение энергии декогезии $G_c = 3171$ мДж/м² (табл. 1), а релаксация напряжений происходит в $(1\bar{1}00)$ I' типа плоскости легкого скольжения (табл. 2). Для остальных плоскостей раскрытия трещины релаксация напряжений происходит в плоскостях базиса или призмы, характеризующихся наиболее низкими значениями γ_{us} (табл. 2). Значения q в этих случаях существенно зависят от ориентации плоскостей скола и скольжения дислокаций в пластической зоне в вершине трещины (значения φ , θ , $f(\theta)$ в формуле (3)).

Были вычислены также значения q (табл. 4) с учетом формирования пластической зоны скольжением расщепленных в соответствии с реакциями (4,5) $a/2$ -сверхчастичных дислокаций в плоскостях базиса и призмы. Из табл. 4 видно, что во всех случаях релаксация напряжений осуществляется в системе скольжения $1/6\langle 1\bar{1}00 \rangle (0001)$, так как значение $\gamma_{us} = 409$ мДж/м² для этой системы в 1.5–2 раза ниже (табл. 2), чем для других систем скольжения. Наиболее низкие значения q (0.61 и 0.68) соответствуют плоскостям скола $(20\bar{2}1)$ II и $(1\bar{1}00)$ I, которые характеризуются высокими значениями $G_c = 3114$ и 3171 мДж/м². Для плоскости ско-

Таблица 3. Значения параметра разрушения q и отношения γ_{us}/γ_c для исследованных плоскостей раскрытия трещин и систем скольжения сверхдислокаций

Плоскость трещины	Система скольжения	q	γ_{us}/γ_c
$(1\bar{1}00)$ I	$1/6[2\bar{1}\bar{1}0](0\bar{1}10)$	1.47	0.207
$(\bar{1}\bar{1}20)$	$1/6[\bar{1}\bar{1}20](\bar{1}\bar{1}00)$	2.11	0.264
$(1\bar{1}00)$ I'	$1/6[2\bar{1}\bar{1}0](0\bar{1}10)$	2.12	0.299
$(1\bar{1}00)$ II	$1/6[2\bar{1}\bar{1}0](0\bar{1}10)$	2.26	0.318
$(\bar{1}\bar{1}21)$	$1/6[\bar{1}\bar{1}20](\bar{1}\bar{1}00)$	2.46	0.245
$(20\bar{2}1)$ II	$1/6[\bar{1}\bar{1}20](0001)$	2.71	0.307
$(20\bar{2}1)$ I	2 варианта	3.97	0.451
	$1/6[\bar{1}\bar{1}20](0001)$		
$(10\bar{1}1)$ II	2 варианта	4.84	0.386
	$1/6[\bar{1}\bar{1}20](0001)$		
$(10\bar{1}1)$ I	2 варианта	5.28	0.421
	$1/6[\bar{1}\bar{1}20](0001)$		
$(11\bar{2}3)$	$1/6[\bar{1}\bar{1}20](\bar{1}\bar{1}00)$	5.53	0.210
$(10\bar{1}2)$	$1/6[2\bar{1}\bar{1}6]\{2201\}$	7.81	1.176
(0001)	2 варианта	9.46	1.334
	$1/6[2\bar{1}16]\{20\bar{2}1\}$		
	12 вариантов		

Таблица 4. Значения параметра разрушения q и отношения γ_{us}/γ_c для исследованных плоскостей раскрытия трещин и систем скольжения частичных дислокаций

Плоскость трещины	Система скольжения	q	γ_{us}/γ_c
(20 $\bar{2}$ 1) II	1/6[$\bar{1}$ 010](0001)	0.61	0.131
(1 $\bar{1}$ 00) I	1/6[$\bar{1}$ 100](0001)	0.68	0.129
(20 $\bar{2}$ 1) I	1/6[$\bar{1}$ 010](0001)	0.89	0.193
($\bar{1}$ $\bar{1}$ 2 $\bar{1}$)	1/6[$\bar{1}$ 100](0001)	0.93	0.153
	2 варианта		
(1 $\bar{1}$ 00) I'	1/6[$\bar{1}$ 100](0001)	0.99	0.187
(1 $\bar{1}$ 00) II	1/6[$\bar{1}$ 100](0001)	1.05	0.198
(10 $\bar{1}$ 1) II	1/6[$\bar{1}$ 010](0001)	1.09	0.165
($\bar{1}$ $\bar{1}$ 20)	1/6[$\bar{1}$ 100](0001)	1.10	0.165
	2 варианта		
(10 $\bar{1}$ 1) I	1/6[$\bar{1}$ 010](0001)	1.19	0.180
(11 $\bar{2}$ 3)	1/6[$\bar{1}$ 100](0001)	2.09	0.131
	2 варианта		

ла (11 $\bar{2}$ 3) получено высокое значение $q = 2.09$, несмотря на то что $G_d = 3122 \text{ mJ/m}^2$ в этой плоскости.

Обсуждение результатов

Соотношение между склонностью материала к разрушению и способностью к пластической релаксации в настоящей работе изучено в модели Райса–Томпсона и Келли [12,13]. Поверхностная энергия Гриффитса, определяющая способность трещины к раскрытию, и энергии нестабильных дефектов упаковки, определяющие энергетические барьеры, которые нужно преодолеть в процессе дислокационного скольжения, исследованы методом молекулярной динамики для экспериментально наблюдаемых плоскостей скола и систем скольжения в Ti_3Al . Энергии поверхностных дефектов $\gamma_c = G_c/2$ (см. табл. 1) изменяются в большинстве случаев в пределах $\gamma_c = 1030–1330 \text{ mJ/m}^2$ и имеют значения $\gamma_c \sim 1550 \text{ mJ/m}^2$ для плоскостей скола (1 $\bar{1}$ 00) I, (20 $\bar{2}$ 1) II и ($\bar{1}$ $\bar{1}$ 23). Для хорошо деформируемых чистых металлов экспериментальные значения поверхностной энергии $\gamma_c \sim 1200–2300 \text{ mJ/m}^2$ [20], для интерметаллида Ni_3Al расчет с помощью метода молекулярной динамики дает значение $\gamma_c \sim 1800 \text{ mJ/m}^2$ [15]. Сравнение этих значений показывает, что для большинства плоскостей скола в Ti_3Al полученные в настоящей работе значения γ_c ниже, чем для чистых металлов и существенно ниже, чем для Ni_3Al . Таким образом, хрупкое разрушение Ti_3Al происходит, в большинстве случаев, вследствие низких значений поверхностной энергии.

Значения энергий нестабильных дефектов упаковки для чистых металлов изменяются в пределах $\gamma_c \sim 100–300 \text{ mJ/m}^2$, для Ni_3Al $\gamma_{us} = 348 \text{ mJ/m}^2$ [15,20]. Самое низкое значение $\gamma_{us} = 409 \text{ mJ/m}^2$ для Ti_3Al в настоящей работе получено для сдвига вдоль направления $\langle \bar{1}100 \rangle$ в плоскости базиса (0001), что превышает

значения γ_{us} для чистых металлов и Ni_3Al . Отметим, что энергия комплексного дефектов упаковки в плоскости базиса равна $\gamma_{CSF} = 197 \text{ mJ/m}^2$, т.е. сравнима по величине как со значением γ_{SF} для чистых металлов (Pt, Pd, Al, Pb $\gamma_{SF} = 100–190 \text{ mJ/m}^2$), так и для Ni_3Al ($\gamma_{SF} = 260 \text{ mJ/m}^2$). Нарушение упорядоченного расположения атомов Ti и Al при сдвиге на произвольный вектор в плоскости базиса, характеризующий обобщенный дефект упаковки (в том числе и γ_{us}) приводит к резкому возрастанию энергии такого дефекта. При сдвиге вдоль направления $\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ в плоскостях призмы и базиса получены еще более высокие значения $\gamma_{us} = 650–950 \text{ mJ/m}^2$. При сдвиге вдоль направления $\langle \bar{1}\bar{1}26 \rangle$ в плоскостях пирамиды значения $\gamma_{us} = 2800–3600 \text{ mJ/m}^2$ столь высоки, что порой превосходят значения энергии поверхностных дефектов γ_c . Таким образом, в интерметаллиде Ti_3Al для плоскостей базиса и призмы, которые являются плоскостями легкого скольжения в этом сплаве, значения γ_{us} высокие, что препятствует формированию пластической зоны и способствует хрупкому разрушению.

В [15] было получено значение безразмерного параметра q , характеризующего меру хрупкости материала, для Ni ($q = 0.63–0.74$) и Ni_3Al ($q = 0.76–0.94$). Уровень значений $q \sim 0.7–0.9$ является количественной мерой более хрупкого поведения Ni_3Al по сравнению с чистым Ni. Для Ti_3Al в целом значения q существенно выше (табл. 3, 4) для всех исследованных плоскостей, что свидетельствует о внутренней природе хрупкости, присущей Ti_3Al .

Хорошо известна сильная ориентационная зависимость деформационных характеристик в Ti_3Al , которая выражается в существенно более высоком значении предела текучести для (0001) ориентации монокристаллов. В этом случае деформация происходит при скольжении в плоскостях пирамиды, так как факторы Шмида в легких плоскостях скольжения (базис и призма) близки к нулю. Особенности геометрии взаимного расположения плоскостей, в которые происходит раскрытие трещины и пластическая релаксация, приводит к тому, что для плоскостей скола (0001) и (10 $\bar{1}$ 2) деформация в плоскостях легкого скольжения оказывается невозможной. Возможное скольжение в плоскостях пирамиды характеризуется резким возрастанием γ_{us} , что в свою очередь приводит к аномально высоким значениям q (табл. 3). Для плоскостей скола ($\bar{1}$ 100) и (10 $\bar{1}$ 2) значения q также достаточно велики и определяются взаимным влиянием нескольких факторов: высокими значениями γ_{us} , достаточно низкими значениями γ_c и неблагоприятным ориентационным фактором $f(\theta)$.

Заключение

С помощью метода молекулярной динамики вычислены энергии декогезии G_c в плоскостях базиса (0001), призмы (1 $\bar{1}$ 00) и ($\bar{1}$ $\bar{1}$ 20), пирамиды {10 $\bar{1}$ 2}, { $\bar{1}$ $\bar{1}$ 23},

$\{10\bar{1}1\}$, $\{11\bar{2}1\}$ и $\{20\bar{2}1\}$. Установлено, что энергия декогезии изменяется в пределах 2060–3170 мДж/м².

Изучены γ -поверхности и получены значения энергий нестабильных дефектов упаковки γ_{us} для сдвига $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ в плоскости базиса, сдвигов $\langle \bar{1}\bar{1}20 \rangle$ в плоскостях базиса и призмы, сдвига $\langle \bar{1}\bar{1}26 \rangle$ в плоскостях пирамиды. Установлено, что энергии нестабильных дефектов упаковки изменяются в пределах $\gamma_{us} = 409\text{--}3608$ мДж/м² при переходе от плоскости базиса к плоскостями пирамиды.

В модели Райса–Томпсона и Келли изучено соотношение между склонностью к разрушению и способностью к пластической релаксации интерметаллида Ti₃Al. Вычислены значения безразмерного параметра q , характеризующего меру хрупкого поведения материала. Получены значения $q = 0.6\text{--}2.0$ для случая формирования пластической зоны скольжения частичных дислокаций Шокли $1/6\langle 1\bar{1}00 \rangle$ в плоскости базиса. При скольжении полных a и $2c + a$ сверхдислокаций в плоскостях базиса, призмы и пирамиды $q = 1.5\text{--}9.5$. Высокие значения q свидетельствуют о внутренней природе хрупкости интерметаллида Ti₃Al.

Работа поддержана грантом РФФИ № 04-02-17311.

Список литературы

- [1] Minonishi Y., Yoo M.H. // *Phil. Mag. Lett.* 1990. Vol. 60. P. 203–208.
- [2] Umakoshi Y., Nakano T., Ogawa B. // *Scripta Materialia*. 1996. Vol. 34. P. 1161–1169.
- [3] Inui H., Toda Y., Shirai Y., Yamaguchi M. // *Phil. Mag. A*. 1994. Vol. 69. P. 1161–1167.
- [4] Inui H., Toda Y., Yamaguchi M. // *Phil. Mag. A*. 1993. Vol. 63. P. 1315–1332.
- [5] Панова Е.В., Карькина Л.Е., Романов Е.П. // *ФММ*. 1993. Т. 75. С. 453–548.
- [6] Legros M., Couret A., Caillard D. // *Phil. Mag. A*. 1996. Vol. 73. P. 61–80.
- [7] Court S.A., Lafvander J.P.A., Loretto M.H., Fraser H.L. // *Phil. Mag.* 1989. Vol. 59A. P. 280–298.
- [8] Minonishi Y. // *Phil. Mag. A*. 1991. Vol. 62. P. 1085–1093.
- [9] Kishida K., Yoshikawa J., Inui H., Yamaguchi M. // *Acta Mater.* 1999. Vol. 47. P. 3405–3410.
- [10] Yakovenkova L., Malinov S., Novoselova T., Karkina L. // *Intermetallics*. 2004. Vol. 12. P. 599–605.
- [11] Yakovenkova L., Malinov S., Karkina L., Novoselova T. // *Scripta Materialia*. 2005. (in press).
- [12] Rice J.R., Thompson R. // *Phil. Mag.* 1973. Vol. 29. P. 73–84.
- [13] Kelly A., Tyson W., Cottrell A.H. // *Phil. Mag.* 1967. Vol. 15. P. 567–586.
- [14] Яковенкова Л.И., Курсанов В.В., Карькина Л.Е. и др. // *ФММ*. 2000. Т. 89. С. 31–38.
- [15] Sun Y., Rice J.R., Truskinovsky L. // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 1991. Vol. 213. P. 243–248.
- [16] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е. // *Изв. РАН, сер. Физическая*. 2001. Т. 65. С. 858–861.
- [17] Rose J.H., Smith J.R., Ferrante J. // *Phys. Rev.* 1983. Vol. B28. P. 1835–1841.

- [18] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // *ЖТФ*. 2003. Т. 73. С. 60–69.
- [19] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // *Проблемы нанокристаллических материалов*. Екатеринбург, 2002. С. 457–469.
- [20] Gornostyrev Yu.N., Katsnelson M.I. et al. // *Phys. Rev.* 2000. Vol. 62 B. P. 7802–7808.