

На правах рукописи

СИНЯЕВ ДАНИЛ ВЛАДИМИРОВИЧ

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН
НАКЛОНА В ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ Ni_3Al**

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Барнаул – 2008

Работа выполнена в Сибирском государственном индустриальном университете и Сибирском физико-техническом институте при Томском государственном университете

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
доцент, Коваленко В.В.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Каширин В.Б.
доктор физико-математических наук, профессор
Демьянов Б.Ф.

Ведущая организация: Институт металлофизики и функциональных материалов
им. Г.В. Курдюмова при ФГУП ЦНИИ Чермет им. И.П. Бардина

Защита состоится 14 февраля 2008 года в 14 часов на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Автореферат разослан 14 января 2008г.

Отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организации, просим посылать в 2-х экземплярах на адрес университета.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук



Романенко В.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Границы зерен (ГЗ) являются неотъемлемой частью поликристаллических, нанокристаллических материалов. Обладая отличительной от основного материала структурой, ГЗ являются активными элементами дефектных образований в материалах. ГЗ могут генерировать и поглощать точечные дефекты – вакансии и примеси, генерировать, поглощать и пропускать дислокации в процессах деформации материала. По этим причинам ГЗ влияют на многие практически важные свойства материалов, такие как прочность, пластичность, ползучесть, хрупкость, электропроводность, образование трещин и коррозия.

Важным элементом, влияющим на атомную структуру и свойства ГЗ, является миграция атомов. Установлено, что миграция атомов по ГЗ протекает значительно интенсивнее, по сравнению с объемом зерна. Однако, вследствие сложности структуры ГЗ механизмы миграции атомов вблизи них многообразны и активация диффузионных процессов может происходить при относительно невысоких температурах. Считается, что ведущим механизмом структурной перестройки является миграция вакансий или межузельных атомов вдоль зернограничных дислокаций.

Все упомянутые выше проблемы, связанные с миграцией атомов и структурной трансформацией материала необходимо исследовать в динамике на атомном уровне. Прямыми экспериментальными исследованиями разрешить данную проблему оказывается технически трудно и сложно. Поэтому применение методов компьютерного моделирования при решении данных задач является оправданным.

Среди сплавов выделяются группы, называемые упорядочивающимися и интерметаллидами, так как они обладают рядом специальных свойств. Одно из важнейших – положительная температурная зависимость предела текучести. Наиболее характерно данное свойство для интерметаллида Ni_3Al . В частности система Ni-Al является основой реально работающих суперсплавов. Физико-механические свойства интерметаллидов непосредственно зависят от процессов, связанных с изменениями атомного порядка, характерного для сверхструктуры определенного типа.

В связи с изложенным представляется актуальным исследование механизмов структурно-энергетической перестройки, происходящей на атомном уровне вблизи границ зерен, имеющих место в интерметаллиде Ni_3Al .

Очевидно, для того, чтобы происходили структурно-энергетические превращения, в материале должны возникать локальные области перераспределения свободного объема, причем со знаком плюс, когда появляется вакансия, и со знаком минус при появлении межузельного атома.

Целью работы является исследование процессов и механизмов атомной перестройки, имеющих место вблизи границ зерен наклона в трехмерном кристалле интерметаллида Ni_3Al . Метод исследования – компьютерный экспери-

мент, базирующийся на подходах, развиваемых на основе применения метода молекулярной динамики.

Для достижения положительного результата в исследованиях были поставлены следующие задачи:

1. Исследование механизмов и условий возникновения миграции атомов и процессов разупорядочения вблизи границ наклона ориентаций $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ при различных углах разориентации в зависимости от температуры и времени эксперимента.
2. Исследование влияния определенной концентрации носителей свободного объема – вакансий и точечных дефектов внедрения на структурно-энергетическую перестройку области, в которой располагается ГЗ.
3. Изучение влияния деформации на механизмы и на процессы структурной перестройки материала вблизи ГЗ наклона в зависимости от угла разориентации и плоскости залегания границы.

Научная новизна диссертации заключается в том, что на примере интерметаллида Ni_3Al впервые были выяснены основные механизмы миграции атомов по границам зерен с осями разориентации $\{111\}$ и $\{100\}$. Выявлен вклад трех основных механизмов – миграции атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций, циклического механизма перемещения цепочек атомов между ступеньками зернограницных дислокаций, механизма миграции атомов между соседними рядами дислокаций в процесс структурно-энергетических изменений в материале, в том числе нарушение ближнего порядка как в объеме бикристалла, так и вблизи ГЗ. Впервые проведены исследования перераспределения свободного объема вводимого внесением в расчетный блок определенной концентрации вакансий или межузельных атомов на процессы миграции атомов в сплаве вблизи ГЗ. Впервые проведены исследования на атомном уровне особенностей протекания деформации сжатия и растяжения вблизи ГЗ наклона, выделены две стадии течения пластической деформации и их основные механизмы. Показана анизотропия процессов миграции в сплаве по подрешеткам Ni и Al и их роль в нарушении ближнего порядка. Важнейшую роль в подвижности в определенном интервале температур играет относительно меньший эффективный атомный размер (γ атомов Ni). В то же время атомы с большим эффективным размером – Al вносят преимущественный вклад в процессы разрушения ближнего порядка как вблизи ГЗ, так и в объеме бикристалла.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что результаты компьютерного эксперимента могут быть использованы для развития теории структурно-энергетической перестройки в многокомпонентных сплавах, содержащих ГЗ.

Полученные методом компьютерного моделирования картины атомной структуры ГЗ при различных условиях воздействия на материал могут быть использованы для анализа электронно-микроскопических изображений высокого разрешения. Полученные результаты могут найти практическое применение в

проблемах использования объемных интерметаллидов в качестве конструкционных и жаростойких материалов, а также в случае наноструктур в качестве материалов с определенным набором интеллигентных свойств. Кроме того результаты молекулярно-динамических исследований могут быть использованы в качестве демонстрационного материала для студентов физических и материаловедческих специальностей, на их базе возможно создание работ для лабораторного практикума.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Перемещения атомов по ГЗ наклона в интерметаллиде осуществляется посредством трех основных механизмов: миграции атомов вдоль ядер ЗГД; циклического механизма перемещения атомов вблизи ядер сверхструктурных дислокаций; цепочек смещений атомов между отдельными сверхструктурными дислокациями.
2. При относительно низких температурах атомы мигрируют преимущественно по подрешетке Ni, при этом ближний порядок может не нарушиться. С ростом температуры в процессе миграции включаются атомы Al, вносящие основной вклад в разрушение ближнего порядка.
3. При наличии в структуре бикристалла носителей свободного объема в виде вакансий миграция протекает более интенсивно.
4. Деформация в зависимости от типа и знака может подавлять и усиливать миграцию и включить коллективные механизмы миграции в виде зернограничного проскальзывания и внутризеренного скольжения.

Апробация работы. Основные результаты проведенных исследований докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях, семинарах и совещаниях: III Евразийской научно-практической конференции “Прочность неоднородных структур”, Москва 2006; XII Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых, Новосибирск 2006; Всероссийской конференции “Деформирование и разрушение структурно-неоднородных сред и конструкций”, Новосибирск 2006; XVI Международной конференции “Физика прочности и пластичности материалов”, Самара 2006; XII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых “Современные техника и технологии”, Томск 2006; IX Международной конференции в электронном формате “Градиентные структурно-фазовые состояния в сталях и сплавах”, Новокузнецк 2006; XVI Петербургских Чтений по проблемам прочности, Санкт-Петербург 2006; III Международной школе-конференции “Физическое материаловедение”, Тольятти 2007; XLVI Международной конференции “Актуальные проблемы прочности”, Витебск 2007; 5th International Conference on “Materials Structure and Micromechanics of Fracture”, 27-29 June, Brno, Czech Republic; E-MRS 2007 Fall Meeting, 17th-21st September 2007, Warsaw, Poland.

Публикации. Результаты работы опубликованы в 4 статьях в центральных и зарубежных изданиях и 12 тезисах докладов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 200 наименований. Работа изложена на 192 страницах машинописного текста, содержит 08 таблиц и 55 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В первой главе дается обзор теоретических и экспериментальных сведений по проблеме, связанной с границами. Дана классификация типов ГЗ, представлены модели описания структуры материала вблизи ГЗ. Выполнен обзор по применению методов компьютерного моделирования в задачах исследования структуры и свойств ГЗ. Обсуждены имеющиеся представления о механизмах структурной перестройки вблизи ГЗ. Приводятся определенные представления об интерметаллиде Ni_3Al , особенностях поведения ГЗ в нем и диффузионной стабильности материала.

Вторая глава содержит описание основных положений, которые были заложены при решении задачи исследования структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона. Обозначены и обсуждены проблемы, которые необходимо учитывать при применении метода молекулярной динамики с целью получения результатов достаточно хорошо соответствующих реальному эксперименту. Показаны преимущества и недостатки метода молекулярной динамики. Описана подробно методика и процедура построения межатомных потенциалов, описывающих межатомные взаимодействия компонентов сплава в нескольких первых координационных сферах. Обоснован набор уравнений, с помощью которых по известным экспериментальным данным находятся параметры потенциала. Показано, что для решения поставленных в работе задач достаточно ограничиться применением модели простого полумэмпирического потенциала Морза в форме

$$\varphi_{KL}(r) = D_{KL} \beta_{KL} \exp(-\alpha_{KL} r) [\beta_{KL} \exp(-\alpha_{KL} r) - 2], \quad (4)$$

где α_{KL} , β_{KL} , D_{KL} – параметры, определяющие взаимодействие пары атомов сорта K и L ; r – расстояние между атомами.

Взаимодействия между парами атомов Ni-Ni и Al-Al определялись путем подгонки параметров по известным из экспериментов данным для чистых металлов Ni и Al, таких как равновесный параметр решетки, энергия сублимации и модуль всестороннего сжатия. Параметры потенциалов Морза, описывающих связи пар атомов Ni-Al, находились по известным из экспериментов данным по равновесному параметру решетки интерметаллида Ni_3Al , модулю всестороннего сжатия с учетом экспериментальных значений энергий образования антифазных границ в плоскостях $\{111\}$, $\{110\}$, и $\{100\}$. Приведены результаты аппроксимации потен-

циалов по ряду известных из экспериментальных свойств сплава Ni_3Al . Подробно изложена и обоснована методика построения расчетного блока кристалла, содержащего ГЗ; выбор оптимального размера блока, набора граничных условий. Схема построения расчетного блока бикристалла, содержащего границу зерна наклона, показана на рис. 1. Расчетный блок обрезался таким образом, чтобы содержал по краям пустот. Атомы, находящиеся за линией межзеренной границы в области другого зерна удалялись. На границе расчетного блока вдоль осей X и Y налагались жесткие условия, вдоль оси Z – периодические. По окончании процедуры построения бикристалла выполнялась динамическая релаксация системы с последующим охлаждением, для перевода его в равновесное состояние. Временной шаг интегрирования движения атомов составлял 10^{-14} с.

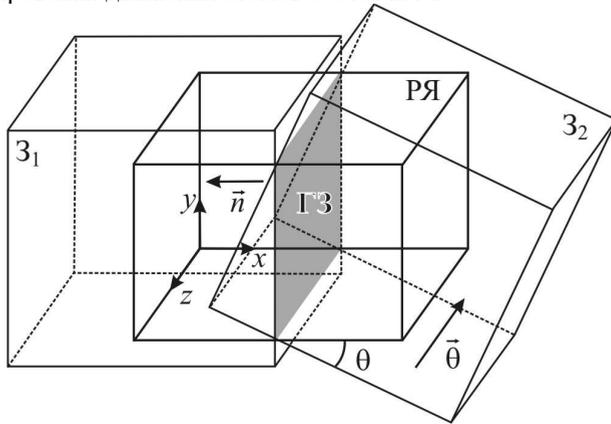


Рис. 1. Схема построения трехмерной расчетной ячейки с границей зерен наклона. Z_1 и Z_2 – зерна, РЯ – расчетная ячейка, ГЗ – граница зерен, $\bar{\theta}$ – вектор разориентации зерен, \vec{n} – единичный вектор нормали ГЗ.

Приводится основной набор визуализаторов, который применен при выполнении поставленной задачи. Набор визуализаторов включал визуализаторы смещений атомов Al и Ni, визуализаторы изменения локальной энергии, происходящей на отдельные атомы, визуализаторы локального распределения ближнего порядка в сверхструктуре сплава в приближении Каули, визуализатор радиального распределения атомов. Количественная характеристика миграции атомов исследовалась посредством расчета коэффициента диффузии, как вблизи границы зерна, так и в объеме бикристалла. По наклону зависимости $\ln D$ (D – коэффициент диффузии) от T^{-1} оценивалась энергия активации процесса диффузии. Были применены визуализаторы, позволяющие исследовать по распределению локальных напряжений структуру бикристалла в объеме, а также наблюдать дислокации. Показаны их положительные стороны, позволяющие выявить физику исследуемых процессов как на микроскопическом, атомном уровне, так и на уровне обобщения на исследуемый бикристалл в целом. Дано объяснение выбора плоскостей залегания ГЗ наклона $\{111\}$ и $\{100\}$, а также углов наклона $\theta=7^\circ, 16^\circ, 22^\circ$.

Третья глава диссертации содержит набор конкретных результатов исследования атомной структуры бикристалла, которая была сформирована после выполнения низкотемпературной динамической релаксации и последующего охлаждения до 0К.

В случае малоугловой границы $\{111\}$ при $\theta=7^\circ$ релаксация атомной структуры происходила за счет коллективных вихревых смещений групп атомов до нескольких десятков, за счет которых происходит перенос массы из одного зерна в другое. В результате граница мигрирует. Данный процесс объясняется «недостатком» свободного объема, для того, чтобы отдельные атомы могли мигрировать независимо. Для малоугловой границы $\{100\}$ при $\theta=7^\circ$ смещения атомов были также коллективными и вихревыми, идущими навстречу друг другу из отдельных зерен, но меньшими по сравнению с ГЗ ориентации $\{111\}$ (рис. 2). С ростом углов разориентации θ до 16° коллективный характер релаксационных смещений атомов не проявлялся. В результате релаксации перестраивалась структура зернограницных дислокаций, в том числе сверхструктурных. Перестройка структуры границы в процессе релаксации реализуется преимущественно посредством перемещения атомов Ni, так как их эффективные атомные размеры значительно меньше, по сравнению с атомами Al (рис.3).

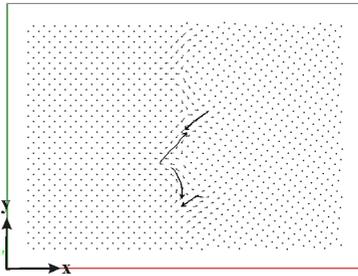


Рис. 2. Картина атомных смещений вблизи ГЗ $[100]$ при $\theta=7^\circ$. Общее смещение атомов

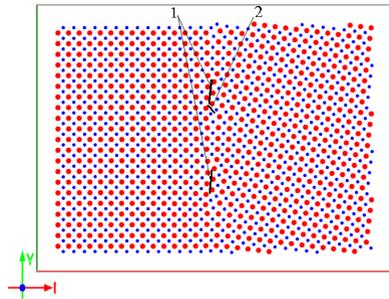


Рис. 3. Атомная конфигурация ГЗ $\{100\}$ при $\theta=7^\circ$. Обозначения \bullet – атомы Al, \bullet – атомы Ni. Упаковка атомов в плоскости $\{100\}$

В зависимости от температуры импульсного разогрева бикристалла были исследованы основные механизмы миграции атомов вблизи границ зерен. Как и в случае чистых металлов, первым механизмом являлось перемещение атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций, затем при более высоких температурах появлялись циклические перемещения групп атомов вблизи ступенек зернограницных дислокаций. Число атомов в таких цепочках возрастает с температурой импульсного разогрева. Затем возникают коллективные перемещения атомов между соседними зернограницными дислокациями. В отличие от чистых металлов [19, 20] в сплаве при относительно невысоких температурах перемещение атомов в интерметаллиде реализуется преимущественно по подрешеткам атомов Al. В результате миграции атомов в области ГЗ происходит нарушение ближнего

порядка, более активное, чем в объеме кристалла. Во всех случаях границ зерен ближний порядок нарушается более интенсивно в зоне, близкой к ГЗ по сравнению с областью бикристалла с ростом температуры и угла разориентации. Пример изменения параметра ближнего порядка для кристалла с ГЗ $\{100\}$ при $\theta=22^\circ$ приведен на рис. 4. Выявлены особенности структурной перестройки в зависимости от плоскости залегания границы и угла разориентации. Графики зависимостей $\ln D$ от $1/T$ по подрешеткам атомов Al и Ni во всех экспериментах демонстрируют большую подвижность атомов Ni по сравнению с атомами Al. Различие в основном увеличивается с ростом температуры. В сравнении с подобными кривыми, полученными для чистых металлов Ni и Al, наблюдается больший разброс в распределении рассчитанных значений $\ln D$ от $1/T$. Однако в целом можно выделить две основные стадии структурной перестройки в бикристалле сплава Ni_3Al (рис. 5), в зависимости от температуры. Наличие данных стадий соответствует излому на графике зависимости $\ln D$ от $1/T$. Получено, что излом соответствует переходу, когда к механизму миграции атомов вдоль зернограницных дислокаций добавляются циклические перемещения атомов около ступенек дислокаций и перемещения групп атомов между соседними зернограницными дислокациями. Температура изменения вкладов различных механизмов смещалась в сторону понижения при увеличении угла разориентации ГЗ. Точка излома по температуре для атомов Al оказывается более низкой по сравнению с характеристиками миграции атомов Ni. Исследованы характеристики скоростей перемещения атомов вблизи ГЗ, оценены значения энергий активаций перемещений атомов Ni и Al в сплаве и рассчитаны зависимости энергий границ в зависимости от угла разориентации.

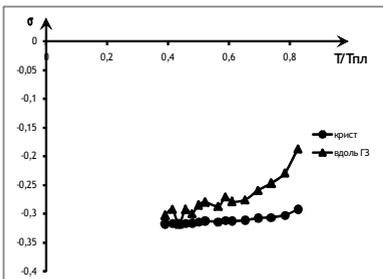


Рис. 4. График изменения параметра ближнего порядка в первой координатной сфере от $\dot{O}/T_{i\bar{e}}$ для ГЗ $\{100\}$ при $\theta=22^\circ$.

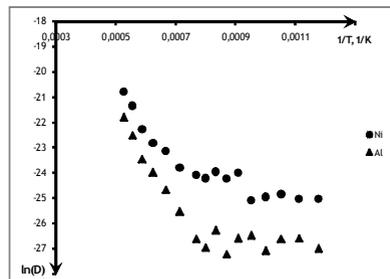


Рис. 5. Графики зависимостей $\ln D$ от $1/T$ для ГЗ $\{100\}$ при $\theta=16^\circ$

Исследованию влияния точечных дефектов – вакансий и точечных дефектов внедрения в зависимости от их концентрации на структурную перестройку вблизи границ зерен наклона посвящена **четвертая глава** диссертации. В компьютерном эксперименте температура импульсного разогрева была взята равной 1200 К. Концентрация точечных дефектов задавалась такой, чтобы не наруша-

лась стехиометрия состава сплава. Было обнаружено, что с ростом концентрации вакансии растет значение коэффициента диффузии, причем для атомов Ni рост оказывается более значительным. Подобная закономерность характерна для всех вариантов исследуемых границ при различных углах разориентации (рис. 6). В случае межузельных атомов различия для атомов Ni и Al оказываются существенными во всех интервалах концентраций точечных дефектов (рис. 7). Подвижность межузельных атомов Ni оказывается в 4-7 раз более высокой по сравнению с атомами Al.

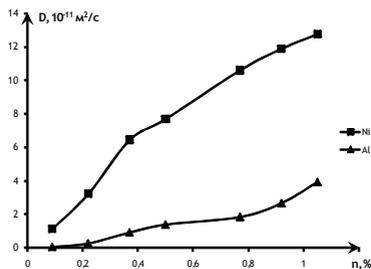


Рис. 6. Графики изменения коэффициента диффузии в зависимости от концентрации вакансий. ГЗ {111} при $\theta=7^{\circ}$

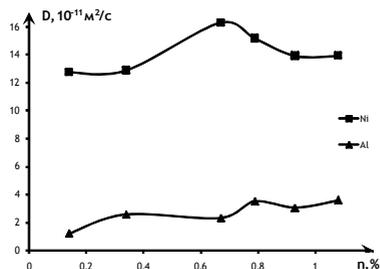


Рис. 7. Графики изменения коэффициента диффузии в зависимости от концентрации точечных дефектов внедрения. ГЗ {100} при $\theta=16^{\circ}$.

Во всех случаях при любых концентрациях вакансий не обнаруживалось заметного эффекта их взаимодействия с ГЗ (рис. 8). Более активно смещались в сторону ГЗ межузельные атомы (рис. 9).

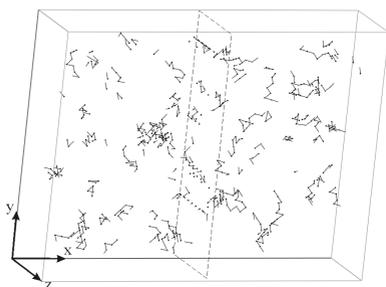


Рис. 8. Картина смещений атомов Al (а) и Ni (б) в блоке бикристалла с ГЗ {100} при $\theta=7^{\circ}$ и концентрации вакансий 0,5 %

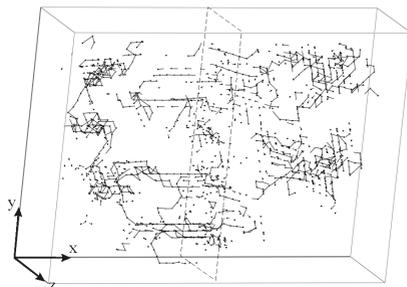


Рис. 9. Картина смещений атомов Al (а) и Ni (б) в бикристалле с ГЗ {111} при $\theta=16^{\circ}$ и концентрации межузельных атомов $n_m=0,5\%$.

В то же время оба типа точечных дефектов оказывали некоторое воздействие на механизмы зернограничной перестройки, смещая их в сторону более низких температур. В пределах объемных частей бикристалла были обнаружены

эффекты агрегатизации точечных дефектов в комплексы. Для межузельных атомов комплексы представлялись в виде тетраэдров или краудионных скоплений. Все виды и механизмы миграции способствовали нарушению ближнего порядка как в объеме бикристалла, так и вблизи ГЗ.

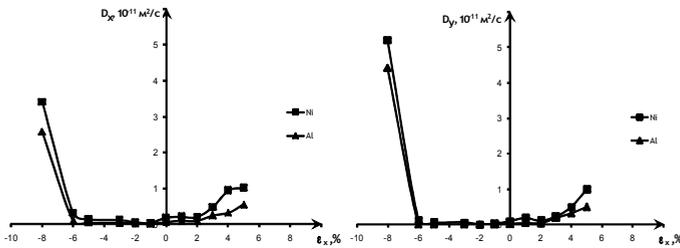
В пятой главе выполнены исследования механизмов структурной перестройки бикристалла Ni_3Al , содержащего ГЗ наклона, подвергнутого деформации одноосного сжатия или растяжения после импульсного разогрева. Одноосная деформация задавалась посредством изменения межатомных расстояний в стартовой конфигурации расчетного блока бикристалла. Деформации задавались посредством изменения межатомных расстояний вдоль осей X , Y , Z . Молекулярно-динамические эксперименты выполнялись в интервале времени 0.1-0.2 пс. Температура в течение заданного времени импульсного разогрева системы была фиксированной. По завершении эксперимента для исключения влияния тепловых смещений на характер структурного состояния материала выполнялась процедура быстрого охлаждения расчетного блока до 0К. Затем рассчитывались коэффициенты диффузии атомов Al , Ni и их средние значения вдоль направлений X , Y , Z .

Одновременно рассчитывались средние значения параметров ближнего порядка в первых координационных сферах вблизи ГЗ и по всему объему расчетного блока кристалла.

Классификация областей деформации условно была представлена следующими ограничениями: областью, соответствующей первой стадии пластической деформации, считался такой интервал деформации, при котором в кристалле наблюдалось только три механизма перемещения атомов: миграция атомов вдоль дислокаций, циклический механизм, цепочки атомных смещений между дислокациями. К области второй стадии пластической деформации относились величины деформации, когда в исследуемых материалах наблюдались механизмы, связанные с коллективными перемещениями большого числа атомов. На этом же интервале активизировались процессы нарушения ближнего порядка, что, по-видимому, было связано с перемещениями атомов Ni по подрешетке Al , при этом должно происходить нарушение порядка за счет появления точечных дефектов замещения.

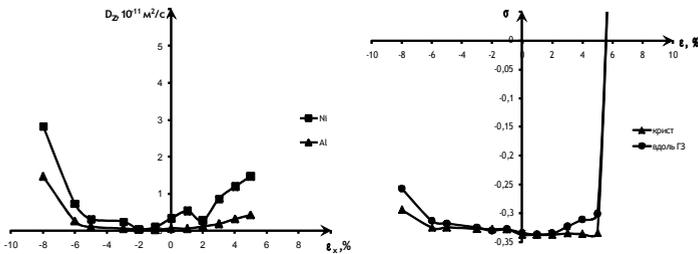
Как показали исследования, ширина области пластической деформации, соответствующей первой стадии, зависит от угла разориентации зерен (это связано как с плотностью зернограницных дислокаций, так с направлением прикладываемой деформации). При каждом случае деформации вдоль осей X , Y или Z рассчитывались три составляющие коэффициента диффузии вдоль тех же направлений. Одновременно рассчитывался параметр ближнего порядка по первой координационной сфере как в целом по кристаллу, так и вблизи ГЗ. На рис. 10 представлены результаты расчета вышеупомянутых параметров для ГЗ ориентации $\{111\}$ при $\theta=7^\circ$. Исследования показали, что ширина области первой стадии пластической деформации зависит от угла разориентации ГЗ и направления приложенной деформации.

Во всех случаях коэффициент диффузии атомов Ni оказывается несколько выше, чем коэффициент диффузии для атомов Al. На первой стадии деформации это различие оказывается небольшим, а при переходе ко второй стадии различие возрастает. Как следует из графиков в зависимости от деформации, вблизи ГЗ параметр ближнего порядка изменяется быстрее, чем в целом по расчетному блоку кристалла. Таким образом, ГЗ является областью, в которой идет более интенсивно процесс разупорядочения при деформации по сравнению с кристаллической областью. В ряде случаев при деформациях растяжения $\varepsilon_x > 6\%$ ($\theta = 7^\circ$), $\varepsilon_y > 4\%$ ($\theta = 22^\circ$), $\varepsilon_z > 4\%$ ($\theta = 16^\circ$) параметр ближнего порядка меняет знак. Это значит, что вторая стадия деформации характеризуется образованием субструктурных блоков со своим порядком. В большинстве случаев деформации растяжения происходило плавное увеличение коэффициента диффузии с ростом растягивающей деформации, что может быть связано с увеличением доли свободного объема в блоке расчетного кристалла. При сжатии на первой стадии происходила локализация полей напряжений дислокаций, что вызывало уменьшение взаимодействия между ними. Для первой стадии пластической деформации наиболее интенсивно миграция атомов протекала вдоль ядер ЗГД – вдоль оси Z (рис.5.9). Для малоугловых границ ($\theta = 7^\circ$) значения коэффициентов диффузии по всем направлениям отличались незначительно (рис.5.1-5.3). Для большеугловых границ ($\theta = 22^\circ$) миграция атомов вдоль оси Y протекала более интенсивно, чем в направлении перпендикулярном ГЗ (вдоль оси X).



а)

б)



в)

г)

Рис. 10. Зависимости коэффициентов диффузии D_x (а), D_y (б), D_z (в) и параметра ближнего порядка в целом по кристаллу и вблизи ГЗ (γ) в сплаве Ni_3Al при температуре 1200 К, содержащем границу зерен $\{111\}$ с углом разориентации $\theta=7^\circ$ от величины деформации вдоль оси x . Отрицательная область – сжатие, положительная – растяжение.

В случае ГЗ, расположенных в плоскостях $\{100\}$ изменения коэффициентов диффузии по осям в зависимости от величины и типа прикладываемой деформации примерно совпадают с зависимостями, характерными для ГЗ $\{111\}$ при тех же углах разориентации.

Особенности структурных изменений, происходящих в бикристалле, содержащем ГЗ наклона, связаны с типом и величиной деформации. При малых уровнях деформации возникает внутризеренное скольжение дислокации и перемещение атомов в основном наблюдается сконцентрированным на границе зерна. На рис. 11 приводится пример картины смещений атомов в структуре ГЗ $\{111\}$ с углом $\theta=16^\circ$. при деформации растяжения, равной 3% вдоль направления X . Просматривается перестройка структуры ГЗ при участии трех механизмов: миграция атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций, циклических перемещений атомов вблизи ступенек дислокаций и междислокационные перемещения атомов.

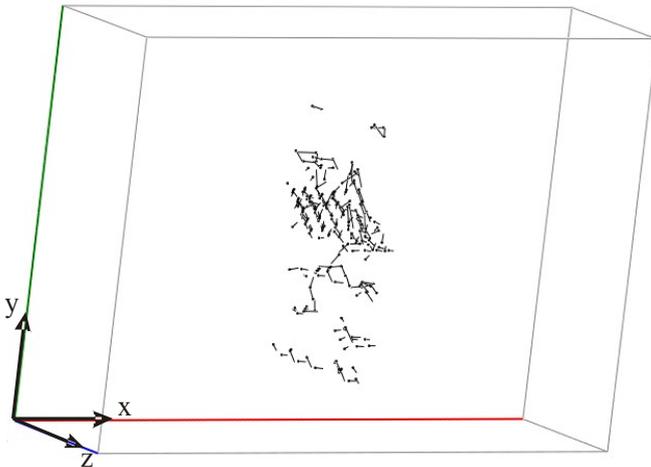


Рис. 11. Картина перемещений атомов вблизи ГЗ $\{111\}$ с углом $\theta=16^\circ$ при деформации растяжения вдоль оси X равной 3%

На рис. 12 (а), (б) показаны примеры структурной перестройки бикристалла, имеющей место на второй стадии пластической деформации. При деформации растяжения вдоль оси X , равной 4%, в структуре бикристалла, содержащего ГЗ $\{111\}$ с углом $\theta=7^\circ$ (рис. 12 (а)) обнаруживается коллективное перемещение атомов относительно ГЗ, соответствующее внутризеренному проскальзыванию. При деформации сжатия, равной 4%, меняется направление внутризеренного скольжения (рис. 12 (б)).

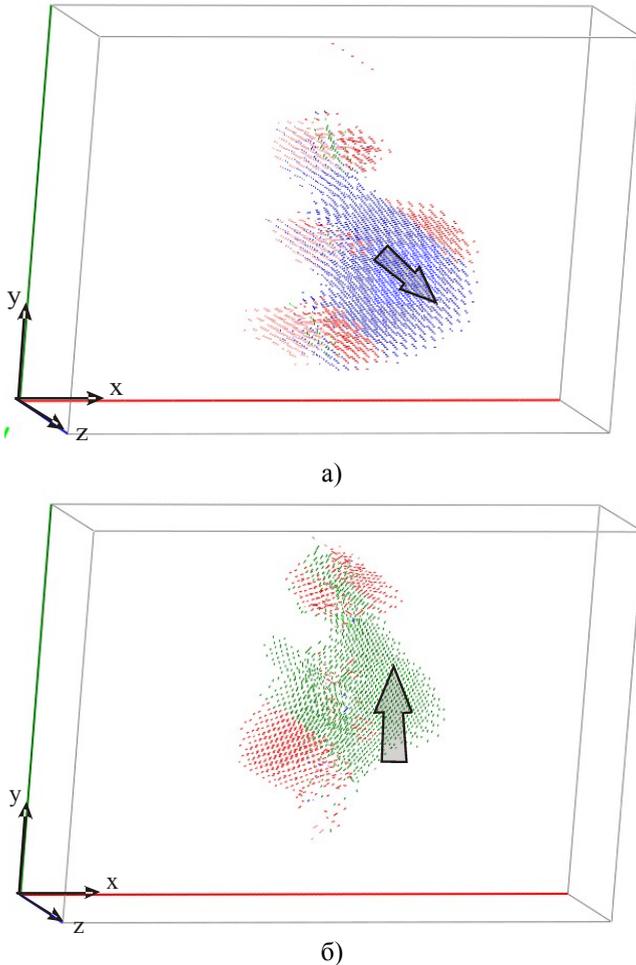
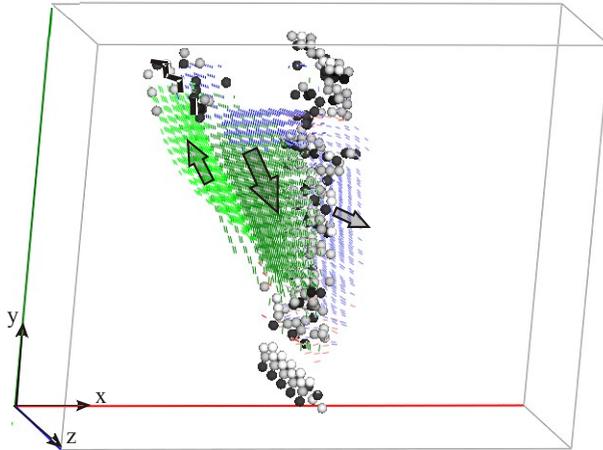
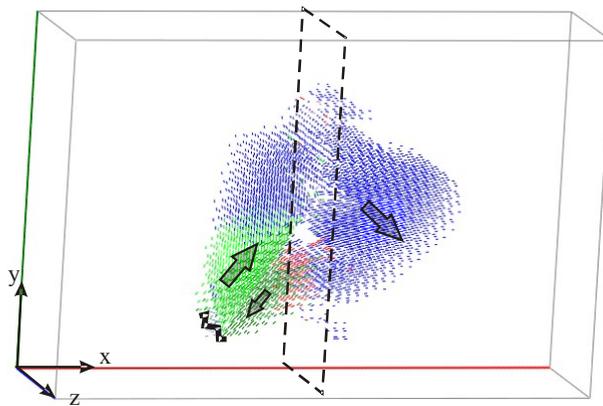


Рис. 12. Примеры зернограничного проскальзывания, наблюдаемого в бикристалле с ГЗ $\{111\}$ с углом $\theta=7^\circ$ при деформации растяжения (а) и деформации сжатия (б) вдоль оси X равной 4%.

При более высоких уровнях деформации коллективные перемещения атомов становятся более интенсивными. На рис.5.13 (а) показано структурная перестройка, имеющая место в бикристалле с ГЗ $\{111\}$ с $\theta=22^\circ$ при деформации сжатия вдоль оси X, равной 8%. Здесь видно, что с ГЗ испускается дислокация, а части кристалла коллективно смещаются, как показано на рисунке стрелками. Коллективные смещения атомов вблизи ГЗ $\{100\}$ $\theta=16^\circ$ и деформации сжатия, равной 10%, приводятся на рис.5.13 (б).



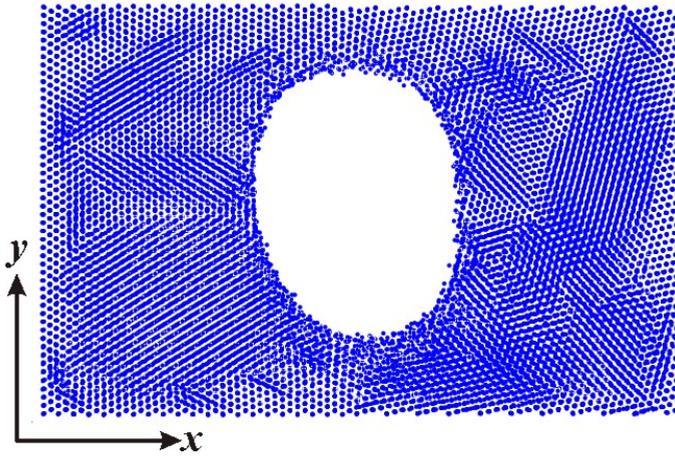
а)



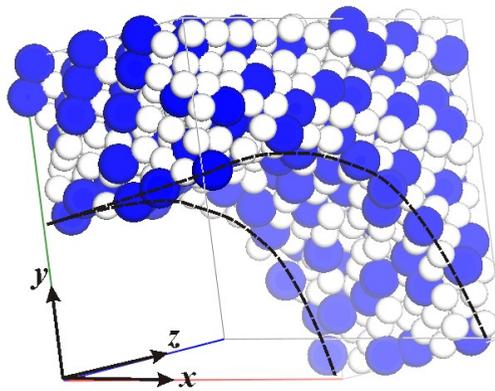
б)

Рис. 13. а) структурная перестройка, имеющая место в бикристалле с ГЗ $\{111\}$ с $\theta=22^\circ$ при деформации сжатия вдоль оси X, равной 8%; б) коллективные смещения атомов вблизи ГЗ $\{100\}$ $\theta=16^\circ$ и деформации сжатия, равной 10%.

При достижении определенного уровня деформации одноосного растяжения вдоль оси Z бикристалла, содержащего ГЗ $\{111\}$, после выполнения процедуры охлаждения до 0K в структуре обнаруживалось появление поры, как показано на рис. 14. На рис. 14 (а) видно, что структура бикристалла вблизи поры расслоилась на отдельные кластеры.



а)



б)

Рис. 14. Образование поры в бикристалле, содержащем ГЗ $\{111\}$ при $\theta=16^\circ$ и деформации растяжения вдоль оси Z , равной 5%: а) проекция на плоскость $\{111\}$; б) пространственная атомная структура поры вблизи ГЗ.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Приведенные в настоящей работе исследования механизмов структурно-энергетических характеристик состояния бикристалла интерметаллида Ni_3Al , содержащего границы зерен наклона, позволили сделать следующие выводы:

1. Исследования атомных перестроек, имеющих место при сопряжении зерен в процессах динамических релаксаций показали, что в случае малоугловых границ смещения носят **коллективный** характер, в результате которого ГЗ мигрирует. С ростом угла разориентации смещения атомов становятся индивидуальными и не носят коллективный характер.
2. Миграция атомов по границам зерен наклона осуществляется действием трех механизмов, как и в чистых металлах: миграции атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций, циклического механизма коллективных перемещений атомов вблизи ступенек зернограницных дислокаций, образования цепочек перемещений атомов от одной дислокации к другой. Каждый из перечисленных механизмов последовательно «включается» дополнительно с ростом температуры, причем для ГЗ ориентации $\{100\}$ температурные пределы оказываются более высокими.
3. Плотность ступенек на зернограницных дислокациях увеличивается с ростом температуры.
4. Все термоактивируемые процессы осуществлялись преимущественно посредством перемещений атомов Ni по их подрешеткам в сверхструктуре. При этом ближний порядок нарушался слабо. При высоких температурах в процесс миграции включались атомы Al, однако их траектории перемещений были незначительными, в то же время они вызывали нарушение сверхструктурного порядка в сплаве.
5. Отклонение от закона Аррениуса связано с последовательной активацией трех основных механизмов миграции, излом на кривой зависимости $\ln D$ от $1/T$ характеризует разные величины энергий активации и с увеличением угла разориентации θ излом перемещается в сторону более низких температур.
6. При наличии в бикристалле вакансий смещаются температурные интервалы действия трех механизмов миграции вблизи ГЗ в сторону понижения тем более значительно, чем больше концентрация вакансий. Вакансии слабо реагируют на наличие ГЗ при малых углах θ . При низких температурах вакансии перемещаются по подрешеткам Ni, не вызывая нарушения порядка сверхструктуры. С ростом температуры три механизма миграции атомов и «вакансионный» активизируют процесс разупорядочения.
7. При введении вакансий в бикристалл различие в коэффициентах диффузии атомов Ni и Al возрастает с ростом концентрации вакан-

сий, так как независимо от того, что вводилось кратное сверхструктуре по подрешеткам Ni и Al число вакансий, последние переходили в подрешетку Ni. При введении внедренных атомов, различие в коэффициентах диффузии атомов Ni и Al оказывалось значительным при любых концентрациях внедренных атомов.

8. В отличие от вакансий, межузельные атомы более активно взаимодействуют с границей зерна, перемещаясь к границе. Термоактивируемые процессы развиваются, преимущественно по механизму миграции межузельных атомов. Внедренные атомы Al преимущественно мигрируют в зоне внедрения ГЗ, а в области бикристалла атомы Ni.
9. В условиях одноосных деформаций растяжения или сжатия графики зависимости коэффициентов диффузии по подрешеткам Ni и Al имеют две области: область незначительного увеличения коэффициентов диффузии при малом уровне деформации и резкого увеличения при больших деформациях. Данные области отнесены к первой и второй стадиям пластической деформации.
10. Первая стадия включает внутризеренное скольжение. На этой стадии «работают» три ранее упомянутые механизмы деформации. На второй стадии развиваются коллективные перемещения атомов по механизмам внутризеренного скольжения и зернограничного проскальзывания. В результате в бикристалле за счет относительных смещений групп атомов могут возникнуть блоки, а при деформации растяжения – поры. Все элементы пластической деформации вызывают нарушение структурного и сверхструктурного порядка.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

1. Старостенков М.Д. Анализ температурных интервалов стабильности двумерных межфазных границ // М.Д. Старостенков, Г.В. Попова, Г.М. Полетаев, Сияев Д.В. // Тезисы докладов III Евразийской научно-практической конференции “Прочность неоднородных структур” / МИСиС. – М., 2006. С. 46.
2. Сияев Д.В. Исследование температурных интервалов стабильности межфазных границ в двумерном металлическом композите Ni₃Al-Ni // Д.В. Сияев, М.Д. Старостенков, Б.Ф. Дембянов [и др.] // Тезисы докладов XII Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых / НГУ. – Новосибирск, 2006. С. 170-171.
3. Сияев Д.В. Оценка стабильности границ зерен в неоднородном интерметаллиде с помощью компьютерного эксперимента // Д.В. Сияев, М.Д. Старостенков, Г.М. Полетаев [и др.] // Тезисы докладов Всероссийской конференции “Деформирование и разрушение структурно-неоднородных сред и

конструкций” / Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН. - Новосибирск, 2006. С.

4. Синяев Д.В. Стабильность границ зерен в интерметаллиде Ni_3Fe // Д.В. Синяев, М.Д. Старостенков, Г.М. Полетаев [и др.] // Тезисы докладов XVI Международной конференции “Физика прочности и пластичности материалов” / СамГТУ. – Самара, 2006. С. 191.
5. Синяев Д.В. Стабильность двумерных межфазных границ в широком диапазоне температур // Д.В. Синяев, М.Д. Старостенков, В.В. Коваленко // Вестник ВГТУ. Серия физико-математическое моделирование. – 2006. – Т.2. – № 4. – С. 122-124.
6. Синяев Д.В. Стабильность двумерных межфазных границ в различных температурных интервалах // Д.В. Синяев, Г.В. Попова, В.В. Коваленко // Тезисы докладов XII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых “Современные техника и технологии” / ТПУ. – Томск, 2006. С. 474-476.
7. Старостенков М.Д. Исследование температурных интервалов стабильности межфазных границ в двумерном металлическом композите $\text{Ni}_3\text{Al-Ni}$ // М.Д. Старостенков, Г.В. Попова, Г.М. Полетаев, Д.В. Синяев [и др.] // Известия вузов. Черная металлургия. – 2006. – № 6. – С.
8. Синяев Д.В. Оценка стабильности границ зерен с помощью компьютерного эксперимента // Д.В. Синяев, М.Д. Старостенков, Г.М. Полетаев [и др.] // Тезисы докладов IX Международной конференции в электронном формате “Градиентные структурно-фазовые состояния в сталях и сплавах” / СибГИУ. – Новокузнецк, 2006. С.
9. Старостенков М.Д. Компьютерное моделирование стабильностей межфазных границ в двумерном металлическом композите // М.Д. Старостенков, Г.В. Попова, Г.М. Полетаев, В.В. Коваленко, Д.В. Синяев // Тезисы докладов XVI Петербургских Чтений по проблемам прочности / СПбГУ. – Санкт-Петербург, 2006. С.
10. Старостенков М.Д. Механизмы диффузии атомов вблизи границ зерен наклона в интерметаллиде Ni_3Al в условиях деформации одноосного сжатия или растяжения // М.Д. Старостенков, Р.Ю. Ракитин, Д.В. Синяев [и др.] // Деформация и разрушение материалов. – 2007. – № 11. – С. 23-25.
11. Старостенков М.Д. Диффузия и структурные изменения вблизи границ зерен в условиях одноосной деформации сжатия-растяжения // М.Д. Старостенков, Д.В. Синяев, Г.М. Полетаев [и др.] // Тезисы докладов III Международной школы-конференции “Физическое материаловедение” / ТГУ. – Тольятти, 2007. С. 66-68.
12. Синяев Д.В. Исследование механизмов диффузии атомов вблизи границ зерен наклона в интерметаллиде Ni_3Al методом компьютерного моделирования // Д.В. Синяев, Р.Ю. Ракитин, М.Д. Старостенков [и др.] // Тезисы докладов XLVI Международной конференции “Актуальные проблемы прочности”. ВГТУ. – Витебск, 2007. С. 240-242.

13. Старостенков М.Д. Стабильность межфазных границ в нанокompозитных материалах системы Ni-Al // М.Д. Старостенков, Г.В. Попова, Д.В. Синяев // II Всероссийская конференция по наноматериалам «НАНО-2007». 13 -16 марта 2007 года, Новосибирск. Сборник тезисов. – Новосибирск, 2007, с. 430.
14. M.D. Starostenkov, D.V. Sinyaev, R.Yu. Rakitin, G.M. Poletaev Diffusion Mechanisms Near Tilt Grain Boundaries in Ni₃Al Intermetallide // On-line Journal of E-MRS Fall Meeting 2007, <http://science24.com/paper/11198>.
15. M. Starostenkov, G. Poletaev, R. Rakitin and D. Sinyaev Interdiffusion and order fracture over grain boundaries in the deformed Ni₃Al Intermetallide // 5th International Conference on “Materials Structure and Micromechanics of Fracture”. Abstract Booklet. MSMF5, June 27-29, 2007, Brno, Czech Republic, p.142.
16. Старостенков М.Д., Холодова Н.Б., Дудник Е.А., Синяев Д.В. Собственные межузельные атомы и их роль в разупорядочении интерметаллида Ni₃Al // Физика твердого тела. Материалы 9-ой международной научной конференции 25-27 мая 2006, Караганда, 2006, с. 136-137.
17. G. Poletaev, R. Rakitin, D. Sinyaev, M. Starostenkov. The simulation of tilt grain boundaries in fcc metals // ICCM 2007, International Conference on Computational Methods, International Conference Center Hiroshima, Japan, 4-6 April 2007, 7H-3, <http://www2.infonets.hiroshima-u.ac.jp/iccm/program/7H.html#7H-3>.
18. Старостенков М.Д. Механизмы диффузии и структурной перестройки кристалла вблизи границ зерен наклона в чистых металлах и интерметаллиде в условиях одноосной деформации различного типа и направления. // М.Д. Старостенков, Г.М. Полетаев, Д.В. Синяев [и др.] // Структура и свойства перспективных металлических материалов. Изд-во НТЛ. Томск 2007. С. 323-344.
19. Starostenkov M.D. The Mechanisms of Atomic Diffusion Near Tilt Grain Boundaries in Ni₃Al Intermetallide with L1₂ Superstructure // M.D. Starostenkov, D.V. Sinyaev, R.Yu. Rakitin, G.M. Poletaev // Book of abstract Electron Microscopy and Multiscale Modelling, 3-7 September, Moscow 2007, EMMM 2007, p. 85.
20. M. Starostenkov, G. Poletaev, R. Rakitin, D. Sinyaev. Interdiffusion and Order Fracture Over Grain Boundaries in The Deformed Ni₃Al intermetallide // On-line Journal Materials Science Forum, pp. 161-164.
21. Синяев Д.В. Засимость энергии границ зерен наклона (111) и (100) от угла разориентации в Ni₃Al // Д.В. Синяев, Г.М. Полетаев, М.Д. Старостенков, А.И. Потекаев // Известия вузов: физика. – 2007, № 11. – С. 33-35.

Издано в авторской редакции.

Подписано в печать 30.11.2007. Формат 60x84 1/16.

Гарнитура Times.

Печать – ризография. Усл.п.л. 1,63. Тираж 100 экз. Заказ 2007-49

Издательство Алтайского государственного технического университета
им. И.И. Ползунова.

656038 г. Барнаул, пр-т Ленина, 46.

Лицензия на издательскую деятельность ЛР № 020822 от 21.09.98.