

ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ЭТАПОВ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ПЕРЕСТРОЙКИ В БИКРИСТАЛЛЕ (Ni+Al), СОДЕРЖАЩЕМ ОДИНОЧНУЮ ВАКАНСИЮ

Н.Ф. Денисова, М.К. Скаков, М.Д. Старостенков

Введение

С помощью СВС в системе Ni-Al, как правило, получают интерметаллиды Ni₂Al и Ni₃Al, с высокой термостабильностью и жаростойкостью, что обуславливает их практическую значимость. Однако, как следует из анализа литературы [1-4], на данный момент не полностью изученными остаются такие вопросы, как механизм растворения компонентов, формирование фазообразования и роль зародышей фаз, влияние свободного объема на диффузионные процессы и т.д. По большей части это связано с недостатком представлений о природе перечисленных явлений на микроскопическом уровне. Реакция СВС в системе Ni-Al на начальных стадиях протекает в режиме твердо-жидкофазного взаимодействия, которое к настоящему времени является одним из наименее изученных диффузионных процессов, что обусловлено сложностью проведения соответствующих «прямых» экспериментов.

Целью настоящей работы является исследование с помощью компьютерного эксперимента влияние одиночной вакансии на начало процесса структурно-энергетической перестройки бикристалла (Ni+Al).

Методика эксперимента

В качестве объекта исследования выбрана тонкая плёнка двумерного матричного кристалла Ni, в которую вкладывалась шестиугольная частица Al размером от 7 до 271 атома. В работе рассматривались стадии СВ-синтеза в зависимости от размещения одиночной вакансии, относительно границы раздела фаз. Расчётный блок бикристалла представлялся упаковкой 10⁴ атомов соответствующей плоскости {111} ГЦК решётки, взаимодействие между различными парами атомов задавались межатомными потенциалами Морзе [5], учитывающими связи в шести первых координационных сферах. За пределами расчётного блока кристалл повторялся введением периодических граничных условий. Динамическая перестройка системы осуществлялась по методу молекулярной динамики [6], скорости смещений атомов при опреде-

лённых температурах задавались согласно распределению Больцмана [7].

В работе для исследования конечного состояния кристалла использовались следующие визуализаторы: визуализатор распределения атомов в кристалле; визуализатор траекторий перемещения атомов; визуализатор изменения фазового состава; визуализатор деформации атомных рядов. В процессе эксперимента фиксировались такие параметры, как коэффициент диффузии, средняя потенциальная энергия кристалла в охлажденном состоянии и средняя энергия, приходящаяся на один атом.

Результаты исследования и их обсуждение

Ранее нами были проведены эксперименты, в которых в матричный никелевый блок кристалла вводились частицы Al; упаковка структуры была идеальной, отсутствовали точечные дефекты и свободный объем. По результатам, этих экспериментов было выяснено, что начальная температура структурной перестройки, при импульсном разогреве зависит от размера частицы Al (см. таблицу 1).

Таблица 1 – Таблица температур начала диффузионной перестройки расчетных блоков

Кол-во атомов Al	Температура, К
7	1800
19	1650
37	1530
61	1500
127	900
217	810
271	800

Введение одной вакансии в бикристалл приводит к резкому понижению температуры начала диффузионных процессов. Так для частицы Al (7 атомов), при введении вакансии в алюминий температура составляет 1000К, при этом вакансия перемещается в центр частицы. Введение вакансии на межфазную границу в никелевую матрицу вызывает диф-

фузионные процессы при температуре 900К. При этом вакансия вновь перемещается в центр алюминиевой частицы. Наличие вакансии в никелевой матрице во втором- четвёртом соседстве от межфазной границы приводит к началу диффузионных процессов при температуре 950К- 1300К и вновь вакансия перемещается в центр частицы алюминия, при этом атом Al диффундирует в никелевую матрицу на межфазную границу. При размещении вакансии в более далёком соседстве в пределах заданного интервала времени компьютерного эксперимента, перемещения вакансии оказывается не чувствительным к наличию частицы Al и вакансия смещается на более далёкие соседства от межфазной границы. Во всех случаях, диффузия наблюдается только в никелевой матрице, основные механизмы диффузии краудсионные и кольцевые. На рисунке 1 показаны траектории перемещения атомов в двух случаях их расположения в бикристалле.

С увеличением размера частицы Al вакансия, размещаемая в никелевой матрице вплоть до пятого соседства (19 атомов) и шестого (37 атомов и более атомов) вновь диффундирует вглубь Al частицы. Вакансия, помещенная далее шестого соседства от межфазной границы, движется только внутри никелевой матрицы. Изменение температуры диффузионных процессов в зависимости от положения вакансии и числа атомов Al приведены в таблице 2.

С увеличением размера частицы Al, в особенности, при реализации начальной стадии структурной перестройки, начинают конкурировать два фактора: наличие вакансии и дислокаций несоответствия, связанных с различием параметров решётки фаз Al и Ni (рисунок 2).

Эксперименты показали, что одиночная вакансия может вносить независимый фактор в диффузионную перестройку бикристалла. Это, прежде всего, реализуется в том случае, когда вакансия располагается в частице алюминия или в никелевой матрице вплоть до пятого- шестого соседства от межфазной границы. участвует в структурной перестройке системы за счёт взаимодействия с дислокационными ядрами, в таких ситуациях обнаруживается пластическая деформация алюминиевой частицы (рисунок 2,б), развивающаяся за счёт «переползания» дислокаций по вакансионным механизмам. В таких процессах дислокации углубляются в алюминиевую частицу, в ряде случаев появляются дислокации и в никелевой матрице. За счёт этих процессов и осуществляется структурная перестройка бикристалла при импульсном разогреве, при этом температура стадии начала перестройки понижается в зависимости от того, где располагается вакансия. При внедрении вакансий в алюминиевую частицу не зависимо от их количества все они перемещаются в центр алюминиевой частицы.

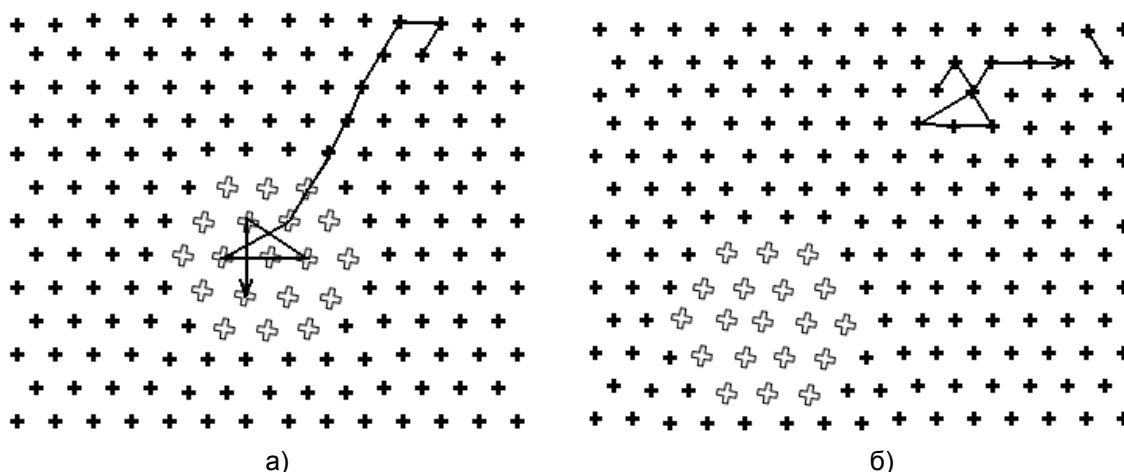


Рисунок 1 – Картины атомных смещений, при размещении вакансии в разных соседствах от частицы Al: а) пятое соседство от межфазной границы; б) шестое соседство от межфазной границы
(+ - атомы Ni; \oplus - атомы Al)

ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ЭТАПОВ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ПЕРЕСТРОЙКИ
В БИКРИСТАЛЛЕ (Ni+Al), СОДЕРЖАЩЕМ ОДИНОЧНУЮ ВАКАНСИЮ

Таблица 2 – Таблица температур, начала процесса диффузии в зависимости от размера частицы Al и удалённости вакансий от межфазной границы

Удалённость вакансии	Температура (К) в зависимости от количества атомов Al				
	7 атомов	19 атомов	37 атомов	61 атом	127 атомов
1 ряд	900	1000	900	850	650
2 ряд	950	1050	950	870	680
3 ряд	1000	1150	950	900	690
4 ряд	1300	1170	970	950	730
5 ряд	1300	1200	1000	970	760
6 ряд	1300	1200	1050	980	800

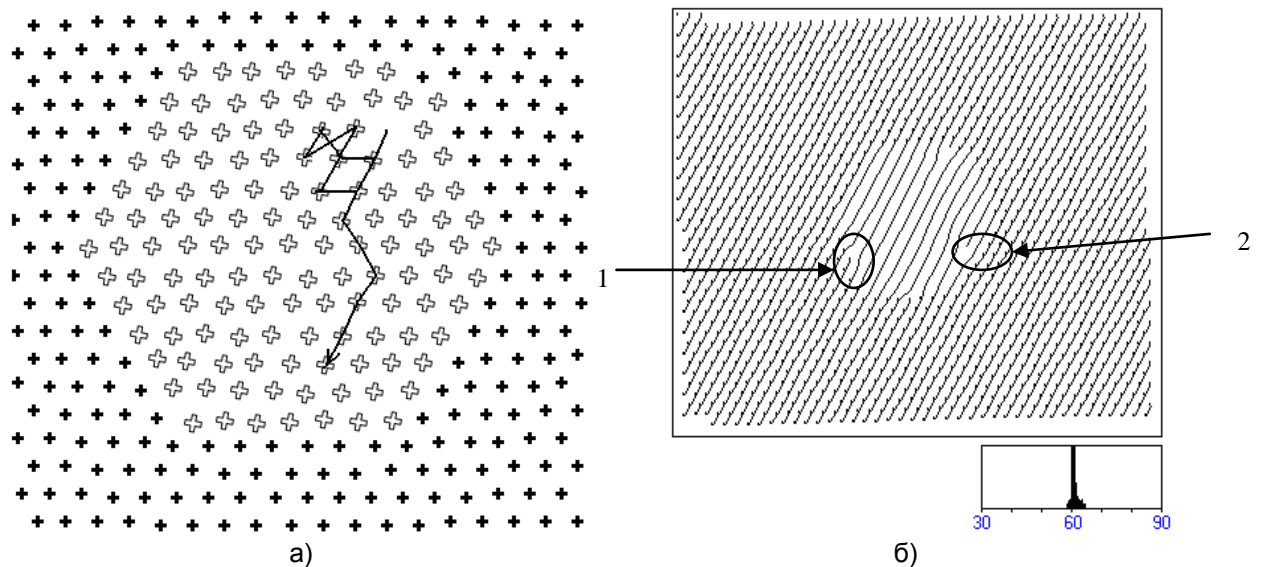


Рисунок 2 – а) вакансионное перемещение атомов (+ - атомы Ni; × - атомы Al); б) перестройка распределения плотноупакованных атомных рядов (1 - дислокация несоответствия, 2- прорастание дислокации несоответствия вглубь алюминия)

Заключение

Таким образом, картину взаимодействия в двумерной системе Ni-Al можно описать следующим образом. До температуры плавления Al основное влияние на скорость и температуру активации диффузии оказывает место размещения вакансии и размер частицы Al. Диффузия осуществляется преимущественно из коррелированных скачков атомов по вакансиям вблизи ядра дислокации вдоль плотноупакованных рядов. В процессе диффузии вакансия, располагающаяся в никелевой фазе не далее шестого соседства от межфазной границы, продвигается в фазу Al, вследствие образования связей Ni-Al, имеющих меньшее межатомное расстояние, чем связь Al-Al. Вместе с этим происходит прорастание дислокаций несоответствия в сторону фазы Al. Продвижение вакансии из никелевой матрицы в алюминиевую частицу приводит к образованию

зародышей интерметаллических фаз. С увеличением температуры и времени компьютерного эксперимента происходит растворение алюминиевой частицы и образование зародышей интерметаллических фаз. При высоких температурах в процессе фазообразования начинают принимать участие пары Френкеля.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-08-50241)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Башев В.Ф., Мирошниченко И.С., Доценко Ф.Ф. Особенности кристаллизации сплавов Al-Ni при сверхбыстром охлаждении// Изв. АН СССР. Металлы, 1989, №6, с. 55-58.
2. Богданов В.И., Рубан А.В., Фукс Д.Л. Энергия связи и термодинамическая стабиль-

ность фазы Ni_3Al // ФММ, 1982, т.53, №3, с. 521-524.

3. Николаев Б.В., Тягунов Г.В., Баум Б.А., Барышев Е.Е., Ларионов В.Н., Хлыстов Е.Н., Булер Т.П., Печатников М.И. Влияние подготовки расплава на структуру и свойства интерметаллидного сплава на основе Ni_3Al // Изв. АН. Металлы, 1991, №1, с. 104-110.

4. Красулин Ю.Л., Баринов С.М., Шлесар М., Парилак Л., Душа Я. Структура и разрушение порошкового алюминид никеля// Порошковая металлургия, 1991, №2, с. 18-24.

5. Смирнов А.А. Молекулярно- кинетическая теория металлов. М: Наука. 1966. 488 с.

6. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура АФГ и её влияние на состояние ре-

шётки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // Физика металлов и металловедения, 1984, т.58, вып. 2., с. 336-343

7. Кристиан Дж. Теория превращения в металлах и сплавах. М.: Мир. 1978. 972с.

Восточно-Казахстанский государственный университет им. С. А. Аманжолова.

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова.