

УДК 548.4

© 1992

РАСЩЕПЛЕНИЕ ДИСКЛИНАЦИЙ И ТРАНСФОРМАЦИЯ «КРИСТАЛЛ—СТЕКЛО» ПРИ МЕХАНИЧЕСКОМ СПЛАВЛЕНИИ

И. А. Овидько, А. В. Осипов

Предлагается теоретическая модель, в рамках которой расщепление дисклинаций в узлах большеугловых границ фрагментов границ зерен деформационного происхождения рассматривается как один из микромеханизмов твердофазной аморфизации при механическом сплавлении. Исследована кинетика зародышей аморфной фазы — «расплывающихся» ядер дисклинаций.

В последние годы большое внимание уделяется изучению эффекта твердофазной аморфизации (трансформация «кристалл—стекло») в металлических материалах при термообработке, интенсивной пластической обработке и механическом сплавлении, что обусловлено интересом к этому эффекту как основе новых технологий синтеза металлических стекол (см. обзоры [1-5]). Микромеханизмы твердофазной аморфизации в настоящее время однозначно не выявлены и представляют предмет дискуссий. В работах [6-8] и книге [9] были предложены модели, описывающие микромеханизмы твердофазной аморфизации при термической и пластической обработках. Цель настоящей работы — анализ микромеханизмов и кинетики твердофазной аморфизации при механическом сплавлении.

Синтез аморфных металлических порошков при механическом сплавлении достигается многочасовой обработкой смеси порошков чистых кристаллических металлов α и β в шаровой мельнице. При этом играют роль диффузионное смешение α - и β -компонент и механическая нагрузка. Поэтому твердофазная аморфизация при механическом сплавлении может осуществляться с помощью как диффузионных микромеханизмов (зернограничная и объемная диффузия [3, 4]), индуцированная диффузией «аморфная» миграция границ зерен [9]), присущих аморфизации при термообработке, так и деформационных микромеханизмов («дислокационное» расплывание границ фрагментов [6, 7, 9], трансформация дислокационного скопления при пересечении двойниковой границы [8, 9]), присущих аморфизации при пластической обработке. Вместе с тем существует микромеханизм аморфизации, который имеет одновременно диффузионную и механическую природу и, следовательно, характерен только для механического сплавления. Это индуцированное диффузией расщепление дисклинаций в стыках границ фрагментов (большеугловых границ зерен деформационного происхождения), которое является основным предметом анализа настоящей статьи.

При высоких степенях пластической деформации, которые, в частности, достигаются и при механическом сплавлении (обработка в шаровых мельницах), в металлических материалах формируются большеугловые границы фрагментов [10]. При этом обычно в стыках границ фрагментов образуются дисклинационные дефекты [10]. Каждая такая дисклинация может расщепиться на

дисклинации меньшей мощности, что сопровождается образованием локальной аморфной области — «распльывшегося» ядра расщепленной дисклинации¹ (рис. 1). Как следствие расщепление дисклинаций в стыках границ фрагментов представляет собой возможный микромеханизм твердофазной аморфизации.

При механическом сплавлении имеются две основные движущие силы для процесса образования аморфной фазы, сопровождающего расщепление фрагментограничных дисклинаций. Первая сила связана с уменьшением упругой энергии дисклинации при расщеплении ее на дисклинации меньшей мощности. Кроме этого, теплота смешения атомов металлов α и β , участвующих в аморфи-

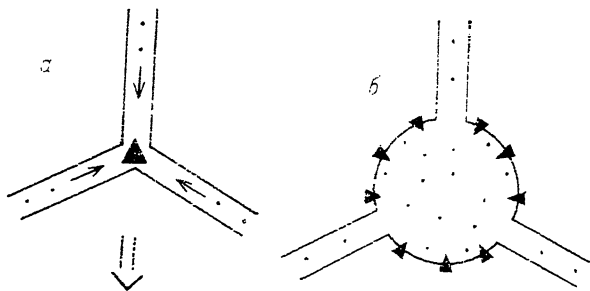


Рис. 1. Индуцированное диффузией расщепление дисклинации.

α — дисклинация в тройном стыке границ фрагментов. Идет диффузия атомов α (черные точки) по границам фрагментов; β — происходит расщепление исходной дисклинации на 3 дисклинации меньшей мощности, что сопровождается образованием зародыша аморфной фазы α - β — «распльывшегося» ядра расщепляющейся дисклинации.

зации при механическом сплавлении, отрицательна [1-4], что обуславливает наличие второй движущей силы для процесса образования аморфной фазы α - β — ядра расщепившейся дисклинации.

Зародыш аморфной фазы на стыке границ фрагментов эволюционирует следующим образом. Вначале протекает интенсивная диффузия атомов α по границам фрагментов в металле β (рис. 1, а). Атомы α попадают в стык границ фрагментов, в котором находится дисклинация. Под действием рассматривавшихся выше движущих сил параллельно с диффузией атомов α из стыка границ фрагментов в окружающую кристаллическую область происходит расщепление дисклинаций, что приводит к образованию зародыша аморфной фазы α - β (рис. 1, б). (При этом параллельный ход диффузии и процесса расщепления дисклинации обеспечивает одновременное эффективное действие обеих движущих сил. Когда же действует только одна из движущих сил, зародыш аморфной фазы растет медленно по сравнению с обсуждающейся ситуацией). Диффузия по границам фрагментов обеспечивает приток новых атомов α в зародыш и область вокруг него, что обуславливает дальнейший рост зародыша аморфной фазы — ядра расщепляющейся дисклинации.

Опишем кинетику индуцированного диффузией расщепления фрагментограничной дисклинации. Будем считать, что стык границ фрагментов и связанный с ним зародыш аморфной фазы обладают аксиальной симметрией. Тогда в соответствии с развитой выше схемой эволюции зародыша аморфной фазы, связанного с расщепляющейся дисклинацией, концентрация n атомов α в зародыше и радиус зародыша R подчиняются следующей системе уравнений:

¹ Аморфизация ядер дисклинаций в 2-мерных кристаллитах наблюдалась также в численных экспериментах [11].

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial n}{\partial r} \right), \quad (1)$$

$$n(R_0(t), t) = n_0, \quad n(R(t), t) = n_c, \quad (2)$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} = - \frac{D}{n_c} \frac{\partial n}{\partial r} \Big|_{r=R(t)}, \quad (3)$$

где t — время; r — координата от центра зародыша; D — коэффициент диффузии атомов α в аморфной фазе $\alpha-\beta$; R_0 — эффективный радиус границы между аморфной фазой и фрагментограничной структурой — источником атомов α ; n_0 — концентрация α -частиц на этой границе (предположим пока $n_0 = \text{const}$); n_c — концентрация частиц α на внешней границе расплывающегося аморфного ядра дисклинации, т. е. границе между аморфной и кристаллической фазами. Уравнение (1) стандартным образом описывает процесс диффузии атомов α в растущем зародыше аморфной фазы — ядре расщепляющейся дисклинации. Выражения (2) представляют собой граничные условия соответственно на внутренней границе (между аморфной фазой и фрагментограничной структурой) и внешней границе (между аморфной и кристаллической фазами) зародыша. Выражение (3) есть уравнение движения внешней границы зародыша.

Обсудим кратко вопрос об учете в модельной системе уравнений (1)–(3) движущих сил процесса аморфизации (уменьшение энергии дисклинации при расщеплении и негативная теплота смешения атомов α и β). Эти движущие силы в рамках предполагаемой модели связываются с величиной n_c в (2) — концентрацией частиц α на внешней границе расплывающегося аморфного ядра дисклинации. Действительно, величина n_c является по существу критической концентрацией частиц α , при которой происходит фазовый переход «кристалл—стекло», сопровождающий расщепление дисклинации в стыке границ фрагментов. Она находится из условия равенства $F_\alpha(n_c) = F_{\text{cr}}(n_c)$ термодинамических потенциалов аморфной фазы (F_α) и кристаллической фазы (F_{cr}) вблизи дисклинации. При этом потенциалы F_α и F_{cr} содержат вклады, связанные с энергетическими характеристиками расщепляющейся дисклинации и теплотой смешения атомов α и β . Как следствие, величина n_c зависит как от энергетических характеристик дисклинации, так и от теплоты смешения атомов α и β . Для предполагаемого в настоящей работе модельного описания эволюции зародыша аморфной фазы точное определение n_c несущественно; достаточно грубой оценки отношения n_0/n_c (см. ниже). Вместе с тем важно отметить, что «дисклинационный вклад» в величину n_c определяет предпочтительность стыка границ фрагментов как места зарождения аморфной области путем диффузии атомов α из границ фрагментов в окружающий материал.

Перейдем теперь к поиску решения предложенной системы уравнений (1)–(3). В рассматриваемой модели длина границы между аморфной фазой и фрагментограничной структурой пропорциональна R , поэтому функцию $R_0(t)$ можно представить как

$$R_0(t) = \lambda^{1/2} R(t), \quad 0 < \lambda < 1, \quad (4)$$

где λ — параметр обрезания, зависящий от геометрии этой границы. Тогда, исходя из симметрии задачи и предполагая для простоты, что $R(0) = 0$, будем искать решение системы (1)–(4) в следующем виде:

$$n(r, t) = n_0 - (n_0 - n_c) f(r^2/4Dt), \quad (5)$$

$$R(t) = 2(\mu Dt)^{1/2}, \quad (6)$$

где μ — неизвестная пока величина, зависящая от λ , n_0 и n_c . Подставив (5), (6) в (1), (2), получим уравнение на функцию $f(x)$

$$xf'' + (1-x)f' = 0, \quad f(\lambda\mu) = 0, \quad f(\mu) = 1, \quad (7)$$

которое имеет аналитическое решение

$$f(x) = \frac{E_1(\lambda\mu) - E_1(x)}{E_1(\lambda\mu) - E_1(\mu)}, \quad (8)$$

$$E_1(x) \equiv \int_x^{\infty} t^{-1} \exp(-t) dt. \quad (9)$$

Константа μ находится из нелинейного уравнения, получаемого подстановкой (5), (6), (8), (9) в (3)

$$\mu \exp(\mu) [E_1(\lambda\mu) - E_1(\mu)] = n_0/n_c - 1. \quad (10)$$

На рис. 2 изображена зависимость величины μ от $n_0/n_c - 1$ для трех значений λ . Определение этой зависимости позволяет с помощью формулы (6) описать кинетику роста зародыша аморфной фазы. Отметим, что найденное решение (6), (10) справедливо не только для постоянных, но и для слабо меняющихся n_0 . Нетрудно убедиться, что критерий применимости этого решения представляет собой следующее условие:

$$\frac{dn_0}{dt} \ll \frac{n_0 - n_c}{t} \frac{(\mu + 1)^2}{\mu}, \quad (11)$$

которое в реальных системах выполняется практически всегда. Таким образом, выражения (6), (10) качественно описывают рост ядра расщепляющейся фрагментограничной дисклинации в аксиально-симметричном случае.

Для $t \sim 600$ с и типичных значений $D \sim 10^{-19} \div 10^{-21} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$, $n_0/n_c - 1 \sim -1 \div -2$, $\lambda \sim 0.5 \div 0.75$ из (6), (10) получаем $R \sim 2 \div 30$ нм. Характеристическая толщина слоя аморфной фазы, образующегося за время 600 с в мультислойной системе Ni—Zr при термообработке, составляет ~ 85 нм [12]. Эти экспериментальные данные, наша оценка величины R и наличие сходства кинетики аморфизации металлических материалов при термообработке и при механическом сплавлении [2] свидетельствуют о том, что индуцированное диффузией расщепление дисклинаций обеспечивает существенный (но не определяющий) вклад в аморфизацию при механическом сплавлении.

Таким образом, индуцированное диффузией расщепление дисклинаций является эффективным микромеханизмом твердофазной аморфизации в металлических материалах при механическом сплавлении.

Список литературы

- [1] Johnson W. L. // Mater. Sci. Eng. 1988. V. 97. P. 4—13.
- [2] Schultz L. // Mater. Sci. Eng. 1988. V. 97. P. 15—23.
- [3] Schwarz R. B. // Mater. Sci. Eng. 1988. V. 97. P. 71—78.
- [4] Samwer K. // Phys. Rep. 1988. V. 161. N 1. P. 1—41.
- [5] Павлов В. А. // ФММ. 1989. Т. 67. № 5. С. 924—944.
- [6] Ovid'ko I. A. // J. Phys. D. 1990. V. 23. N 3. P. 365—367.
- [7] Овидько И. А. // Письма в ЖТФ. 1990. № 16. № 12. С. 1—4.
- [8] Ovid'ko I. A. // Mater. Sci. Eng. A. 1990. V. 128. N 2. P. 5—7.

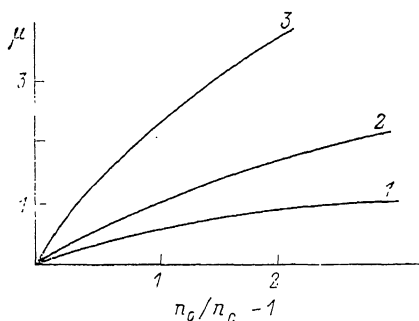


Рис. 2. Зависимость μ от $n_0/n_c - 1$ для $\lambda = 0.25$ (1), 0.5 (2), 0.75 (3).

- [9] Овидько И. А. Дефекты в конденсированных средах: стеклах, кристаллах, квазикристаллах, жидких кристаллах, магнетиках, сверхтекучих жидкостях. Л.: Наука, 1991. 202 с.
- [10] Рыбин В. В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
- [11] Михайлин А. И., Романов А. Е. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 2. С. 601—603.
- [12] Meng W. L., Nieh C. W., Ma E., Fultz B., Jonson W. L. // Mater. Sci. Eng. 1988. V. 97. P. 87—91.

Филиал института машиноведения
им. А. А. Благодирова
РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
10 апреля 1991 г.
В окончательной редакции
6 сентября 1991 г.