Накопление дислокаций и термическое упрочнение в сплавах со сверхструктурой *L*1₂

© В.А. Старенченко, Ю.В. Соловьева, Ю.А. Абзаев

Томская государственная архитектурно-строительная академия, 634003 Томск, Россия

(Поступила в Редакцию 20 июля 1998 г.)

Рассмотрены механизмы накопления дислокаций в сплавах со сверхструктурой $L1_2$, связанные с образованием барьеров Кира-Вильсдорф и торможением сверхдислокаций в процессе пластической деформации. Построена модель кинетики накопления дислокаций в процессе пластической деформации, на основе которой сформулирована математическая модель термического и деформационного упрочнения монокристаллов сплавов со сверхструктурой $L1_2$. Результаты численных расчетов модели сравниваются с экспериментально наблюдаемыми закономерностями деформационного и термического упрочнения монокристаллов Ni₃Ge.

В результате экспериментальных исследований механических свойств и дислокационной структуры монокристаллов интерметаллида Ni₃Ge нами были установлены следующие характерные особенности температурной зависимости предела текучести, кривых упрочнения и эволюции дислокационной структуры этого сплава [1–3].

 Температурная зависимость предела текучести многостадийна, а восходящая ветвь этой зависимости, формирующаяся в условиях октаэдрического скольжения, может быть описана как двухстадийная с двумя энергиями активации.

2) При повышении температуры кривые упрочнения изменяют форму от кривых, близких к кривым упрочнения чистых металлов, в низкотемпературной области, к параболическим кривым, обращенным выпуклостью вверх, в высокотемпературной области. Темпы изменения кривых упрочнения с температурой, как и интенсивность возрастания предела текучести, увеличиваются при переходе от множественного к одиночному скольжению.

 Интенсивности накопления плотности дислокаций возрастают с ростом температуры в большей степени в случае одиночного скольжения, чем в случае множественного.

4) Барьеры Кира-Вильсдорф (КВ) интенсивно накапливаются в области умеренных (вблизи комнатной) температур. При более высоких температурах наблюдается процесс вытеснения барьеров КВ дислокациями, заблокированными в произвольных непрямолинейных конфигурациях, интенсивность накопления барьеров КВ падает.

5) Длина барьеров КВ пропорциональна расстоянию между дислокациями "леса".

6) В ориентациях, близких к углу [111] стереографического треугольника, в высокотемпературной области наблюдается максимум на температурной зависимости предела текучести в условиях, когда деформация осуществляется кубическим скольжением. При этом дислокационная структура сформирована заблокированными дислокациями краевой ориентации. Эта совокупность экспериментальных данных позволяет предположить, что в процессах термического упрочнения в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ участвуют не только механизмы блокировки винтовых дислокаций вследствие образования барьеров КВ, но также и механизмы, связанные с переползанием краевых дислокаций при взаимодействии их с точечными дефектами.

В настоящей работе предлагается математическая модель термического упрочнения, учитывающая особенности образования барьеров КВ в присутствии дислокаций леса, а также взаимодействие с точечными дефектами и влияние его на процесс образования барьеров КВ и описывающая некоторые закономерности формирования дислокационной структуры текучести и кривых упрочнения в интерметаллидах со сверхструктурой L1₂.

1. Длина барьеров Кира-Вильсдорф

Сверхдислокация, пересекающая при своем движении дислокации других систем скольжения, под воздействием деформирующих напряжений приобретает сложную конфигурацию, состоящую из множества дислокационных сегментов, закрепленных междислокационными реакциями. Рассмотрим дислокационный сегмент винтовой ориентации, расположенный в плоскости (111), закрепленный на концах в точках A и B в поле касательных напряжений τ (рис. 1).



Рис. 1. Схема изменения конфигурации дислокационного сегмента при образовании барьера Кира-Вильсдорф.

Под воздействием напряжения τ свободный дислокационный сегмент приобретает форму дуги раиусом кривизны $R = 2Gb/\tau$ [4], где 2b — модуль вектора Бюргерса свехдислокации, G — модуль сдвига. Пусть вследствие термофлуктуации дислокационный сегмент изменил свою конфигурацию: ведущая сверхчастичная дислокация перешла в плоскость (100), т.е. началось образование барьера KB (начальная стадия термофлуктуационного образования барьеров KB подробно рассмотрена в работах [5,6]; здесь же приведены расчеты энергии активаций образования барьеров KB). В результате возникает новая конфигурация, состоящая из прямолинейного участка сверхдислокации (длины *x*), который является барьером KB, и из двух дуг радиуса *R* сверхдислокаций, оставшихся в плоскости (111) (рис. 1).

Длину образовавшегося барьера (x) определим из рассмотрения энергии образующейся дислокационной конфигурации, которую можно приближенно записать как сумму энергий барьеров КВ и сегментов, залегающих в плоскости октаэдра,

$$U = xU_k + U_s(AB + CD), \tag{1}$$

где U_k — энергия единицы длины барьера КВ, U_s — энергия дислокации в плоскости октаэдра. Смысл остальных величин ясен из схемы на рис. 1. Утчем, что конфигурация с барьером КВ возникла в поле напряжений, вследствие чего часть энергии приобретается барьером за счет работы, совершаемой напряжением. Тогда функция, минимум которой будет определять линейный размер (x) барьера КВ, примет вид

$$\phi(x) = U_k x + U_s (AB + CD) + 4\tau_{(111)} bS(x) - \tau_{(100)} bx\delta, \quad (2)$$

где S(x) — площадь, заметаемая сегментами AB и CD, $\tau_{(111)}, \tau_{(100)}$ — напряжения в плоскостях октаэдра и куба соответственно, δ — ширина сверхдислокации в плоскости куба.

Пренебрегая расщеплением сверхчастичных дислокаций, энерии U_k и U_s представим как сумму энергий антифазных границ, заключенных между сверхдислокациями $(U^{(1)})$, энергии упругого взаимодействия сверхчастичных дислокаций $(U^{(2)})$ и собственных энергий сверхдислокаций $(U^{(3)})$

$$U_k = U_k^{(1)} + U_k^{(2)} + U_k^{(3)}, \quad U_s = U_s^{(1)} + U_s^{(2)} + U_s^{(3)}.$$
 (3)

В расчете на единицу длины дислокации можно принять

$$U_{k} = \zeta_{(100)} r_{1} - \frac{Gb^{2}}{2\pi} \ln \frac{r_{1}}{R_{0}} + 2Gb^{2},$$
$$U_{s} = \zeta_{(111)} r_{2} - \frac{Gb^{2}}{2\pi} \ln \frac{r_{2}}{R_{0}} + 2Gb^{2}.$$
(4)

Здесь $\zeta_{(100)}$, $\zeta_{(111)}$ — энергия антифазных границ (АФГ) в плоскостях (100) и (111), r_1, r_2 — ширина сверхдислокации, R_0 — радиус экранирования упругого поля дислокации. Ширина сверхдислокации в плоскости октаэдра определится из условия равновесия сил натяжения АФГ и упругого отталкивания сверхчастичных дислокаций [7]

$$r_2 = Gb^2 / 2\pi \zeta^{(111)}.$$
 (5)

В случае барьера КВ при определении его ширины необходимо учитывать также и действующее в этой плоскости напряжение, поскольку одна из сверхчастичных дислокаций в процессе образования барьера закреплена. Учет этого обстоятельства приводит к выражению

$$r_2 = Gb^2 / 2\pi (\zeta_{(100)} - \tau_{(100)}b).$$
(6)

Учитывая явный вид S(x), выражение (2) можно привести к виду

$$\phi(x) = 4U_s R \sin Y + U_k x - \tau_{(100)} b \delta x$$

$$- 2\tau b \left\{ \left[R - \sqrt{R^2 - a^2/4} \right] \frac{x}{4} - \frac{R^2}{2} (2 \arcsin Y + 2 \sin Y - \sin(\arcsin Y) + 2 \sin Z - \sin(2 \arcsin Z)) \right\},$$
(7)

где

$$Y = \frac{\sqrt{(a-x)^2/4 + (R + \sqrt{R^2 - a^2/4})^2}}{2R},$$
$$Z = \frac{\sqrt{a^2/4 + (R + \sqrt{R^2 - a^2/4})^2}}{2R}.$$

Функция $\phi(x)$ имеет минимум на промежутке $x \in [0, a]$, положение которого зависит от величины $\gamma = \zeta_{(100)}/\zeta_{(111)}$ и определяется уравнением

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = 0,\tag{8}$$

обусловливающим значение равновесной длины барьера KB в зависимости от величины параметров, входящих в $\phi(x)$.

Не приводя результатов расчетов уравнения (8) для значений параметров, характерных для Ni₃Ge (G = 70 GPa, $\rho = 10^{14} \text{ m}^{-2}$, $b = 2.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, $\tau = 175 \text{ MPa}$, $\zeta = 0.25 \text{ J}/\text{m}^2$, $R = 2Gb/\tau$, $a = 1/\sqrt{\rho}$) [8], остановимся на их качественном анализе.

Увеличение плотности дислокаций приводит к увеличению деформирующих напряжений (здесь полагалось $\tau = \alpha Gb \rho^{1/2}$, $\alpha = 1$), что в свою очередь вызывает возрастание относительной длины барьера. Это изменение не очень велико, и при увеличении плотности дислокаций на порядок оно не превышает 10%.

Изменение напряжений в плоскости куба (принималось $\tau_{(100)} = \beta \tau_{(111)}$) не вызывает значительных изменений длины барьера. Изменение величины β от 0 до 1.5 изменяет длину барьера в 1.1 раза. Следует, однако,



Рис. 2. Зависимость относительной длины барьера Кира-Вильсдорф от напряжения трения $\gamma = 0.2$ (1) и 0.5 (2).

отметить, что при больших напряжениях $\tau_{(100)}$ возможно формирование коротких барьеров КВ ($x/a \approx 0.1$) даже при одинаковых значениях энергий АФГ в плоскостях октаэдра и куба, что свидетельствует о возможности возникновения барьеров при перерасщеплении в поле напряжений сверхдислокаций в плоскостях октаэдра.

Ведущим параметром, определяющим длину барьера, является относительное изменение энергии АФГ при переходе сверхдислокации в плоскость куба (параметр $\gamma = \zeta_{(100)}/\zeta_{(111)}$), вариация которого может приводить к весьма значительным изменениям длины барьеров, вплоть до их исчезновения. Для параметров, характерных для Ni₃Ge ($\gamma \approx 0.2$), длина барьера составляет $\approx 0.7a$, где a — расстояние между точками закрепления сегмента сверхдислокации.

При дальнейшем анализе барьеров КВ необходимо учесть еще по крайней мере два фактора. Первый из них связан с тем, что сегменты *AB* и *CD* при образовании барьера приобретают ориентацию, приближающуюся к краевой, и вследствие этого испытывают дополнительное торможение τ_F при взаимодействии этих сегментов с точечными дефектами. Равновесная длина в этом случае должна определяться функцией $\phi^*(x) = \phi(x) + \tau_F S(x)$. Второй фактор заключается в том, что при образовании барьера изменяется угол атаки на стопоры, закрепляющие дислокационный сегмент. Если угол превысит критический, то это приведет к прорыву стопора и увеличению длины барьера КВ.

Рассмотрим первый фактор. Расчеты (полагалось $\rho = 10^{12} \text{ m}^{-2}$, $\tau = 60 \text{ MPa}$, $\beta = 1$) зависимости относительной длины барьера КВ от напряжения трения краевой компоненты дислокационного сегмента для разных значений энергии АФГ показали, что наблюдается значительная зависимость длины барьера КВ от трения, испытываемого краевой компонентой петли (рис. 2). Уже при превышении трением действующего напряжения на 25% для невысоких энергий АФГ ($\zeta \approx 0.5 \text{ J/m}^2$) образование барьеров КВ становится энергетически невыгодным. При высоких энергиях АФГ требуются более

высокие напряжения трения для того, чтобы остановить процесс образования барьеров.

Зависимость длины барьера КВ от величины трения, испытываемого краевыми дислокациями, может приводить к тому, что при повышении температуры, несмотря на возрастание вероятности образования этих барьеров, их общая длина будет уменьшаться вследствие "вытеснения" краевыми компонентами дислокационной петли.

Возможность разрушения междислокационных реакций, закрепляющих свободные сегменты дислокаций, рассмотрим с учетом сил трения краевой дислокации. Будем полагать, что длина дислокационного барьера (при $\zeta = 0.2 \,\text{J}/\text{m}^2$) будет принимать равновесные значения, соответствующие минимуму функции $\phi^*(x)$. В этом предположении оценки изменения угла атаки на стопоры, закрепляющие дислокационный сегмент, показывают, что в зависимости от значения критического угла атаки (т. е. от прочности стопора) напряжения прорыва стопора по-разному изменяются при возникновении барьера КВ. При этом оказываются малочувствительными к наличию барьера напряжения прорыва слабых стопоров (критические углы атаки 2.8-3 радиана), либо очень прочные стопоры, которые огибаются по механизму Орована (критические углы близки к нулю). Напряжение преодоления стопоров средней прочности может изменяться на 20–25%. При наличии трения (τ_F) изменение прочности стопоров тем меньше, чем выше напряжение трения.

Изменение прочности стопоров будет приводить к тому, что барьеры КВ при своем возникновении не будут удерживаться ближайшими соседними стопорами; наоборот, прорывая стопоры средней прочности, они будут увеличивать свою длину до тех пор, пока не достигнут стопора высокой прочности.

Можно полагать поэтому, что средняя длина барьера КВ пропорциональна расстоянию между прочными стопорами, которыми в данном случае являются междислокационные реакции высокой прочности. Не уменьшая общности, можно положить $L = \omega \rho^{-1/2}$, где L — длина барьера КВ, ρ — плотность дислокаций леса, ω — константа пропорциональности. Это предположение позволяет рассчитать интенсивность накопления дислокаций, связанную с образованием барьеров КВ.

Прочность барьеров Кира-Вильсдорф. Вклад в сопротивление движению дислокаций

Традиционно принято считать, что барьеры КВ вносят большой вклад в сопротивление движению дислокаций, который достигает предельного значения $\tau \approx \zeta/b$, где ζ — энергия АФГ. Такое мнение связано прежде всего с тем, что дислокации рассматриваются как точечные объекты, и в связи с этим напряжение, необходимое для разрушения барьера КВ, оказывается равным ζ/b , поскольку для движения дислокации оказывается необходимым развертывание АФГ в плоскости (111) [9].



Рис. 3. Схема разрушения барьера Кира-Вильсдорф. *ABDF* — первоначальная конфигурация барьера Кира-Вильсдорф (A и F — дислокационные реакции); *ABEG* конфигурация, возникшая в результате разрушения реакции F (G — новый стопор, препятствующий движению сегмента L(x)).

В реальности дислокация не является точечным объектом, в связи с чем механизм разрушения барьера КВ может быть иным. Возможно несколько вариантов: 1) барьер КВ закреплен на концах междислокационными реакциями, которые при некотором критическом угле разрушаются; 2) барьер КВ огибается по механизму Орована. В первом случае возникает конфигурация, изображенная на рис. 3. В этой конфигурации x — длина барьера КВ, L(x) — длина подвижного дислокационной конфигурации, изображенной к вопросу о равновесии дислокационной конфигурации, изображенной на рис. 3, в поле касательных напряжений τ . Задача сводится к нахождению минимума функции

$$\Phi(x) = xU_k + L(x)U_s - \tau bS(x), \tag{9}$$

где S(x) — площадь, заметаемая сегментом *L*. Решение задачи показывает, что барьеры КВ разрушаются напряжением, величина которого близка к значениям $\tau \approx \alpha G b \rho^{1/2}$, определяемым сопротивлением дислокационного "леса". Лишь барьеры, для которых параметр $c \cong 0$, могут сохраняться при более высоких напряжениях. Устойчивыми к воздействию внешнего напряжения оказываются барьеры, закрепленные прочными междислокационными реакциями, критический угол для которых близок к нулю. В этом случае барьер КВ может быть преодолен по механизму Орована, соответствующая прочность барьера будет определена этим напряжением.

Оценим вклад, который будут вносить образующиеся барьеры в сопротивление движению дислокаций. В первом случае этот вклад будет определяться плотностью барьеров в зоне сдвига и разностью энергий $\Delta U = U_k - U_s$.

Пусть в результате термических флуктуаций на единице площади в зоне сдвига возникло N барьеров, которые затем были разрушены при дальнейшем движении дислокационной петли. Средняя длина таких "виртуальных" барьеров может быть принята приближенно равной $\rho^{-1/2}$, т.е. равной длине свободного сегмента дислокации. Работа деформации, совершаемая внешним напряжением $(\tau \Delta a)$, равна работе по расширению дислокационных петель. Тогда

$$\tau = \frac{\delta A}{b\Delta S},\tag{10}$$

где *S* — средняя площадь, заметаемая дислокационной петлей при образовании зоны сдвига,

$$\delta A = \delta A_s + \delta A_\rho + \delta A_F. \tag{11}$$

Здесь A_s — работа по разрушению барьеров KB, A_ρ — работа по преодолению дислокационного леса, A_F — работа сил трения. Работа по разрушению барьеров KB равна

$$\delta A_s = N S \rho^{-1/2} \Delta U, \quad N = \frac{\nu b}{\upsilon} \frac{w_s}{l_{cs}^2} \exp\left(-\frac{U}{kT}\right), \quad (12)$$

где ν — частота Дебая, w_s — доля винтовых дислокаций, l_{cs} — длина участка дислокации, испытывающего термоактивируемую рекомбинацию, U — энергия активации образования барьера КВ, v — средняя скорость движения дислокации. Тогда

$$\frac{dA_s}{dS} = \tau_s \cong \frac{\nu b}{\upsilon} \frac{w_s}{l_{cs}^2} \Delta U \exp\left(-\frac{U}{kT}\right).$$

В предельном случае $(T \to \infty)$

$$\exp\left(-\frac{U}{kT}\right) = 1; \quad \tau_s^{(\max)} \cong \frac{\nu b}{\upsilon} \frac{w_s}{l_{cs}^2} \Delta U \rho^{-1/2}.$$

Оценим τ_s из следующих соображений: $w_s \approx 0.5$, $\upsilon \approx 100 \, {\rm m/s}, \nu = 10^{13} \, {\rm s}^{-1}, l_{cs} = 10^{-6} \, {\rm m}$ [9]. На пределе текучести ($\rho^{-1/2} \approx 10^{-6} \, {\rm m}^{-1}, \, \Delta U \approx 7 \cdot 10^9 \, {\rm eV} \cdot {\rm m}^{-1}, \, \tau_s^{({\rm max})} \approx 13.4 \, {\rm MPa}$) получим величину, малую даже по сравнению с вкладом в сопротивление движению со стороны дислокаций леса.

В случае, когда барьер КВ огибается по механизму Орована, величина ΔU определяется энергией, необходимой для образования дислокации, замыкающей дислокационную дипольную конфигурацию. Приближенно эту энергию можно принять равной $U_s \approx 1.3 \cdot 10^{11} \text{ eV} \cdot \text{m}^{-1}$, что при вычислении τ_s дает значение $\tau \approx 200 \text{ MPa}$. Эта завышенная оценка позволяет получить максимальное значение $\tau_s^{(\text{max})}$. Оно более чем вдвое меньше величины ζ/b и соответственно значительно меньше экспериментально наблюдаемых величин предела текучести в области температур пика аномалии.

Интенсивность накопления дислокаций, определяемая механизмом Кира-Вильсдорф

Рассмотрим процесс накопления дислокаций при пластической деформации. Будем полагать, что пластическая деформация осуществляется вследствие образования зон сдвига — областей заторможенного сдвига. Пусть в процессе работы источника дислокаций испущено *п* дислокационных сдвигообразующих петель, в результате расширения которых образовалась зона сдвига. Образуется некоторая структура из дислокаций, прекративших свое движение. При этом все дислокации, образовавшиеся в результате возникновения зоны сдвига, могут быть разделены на две категории: внутризонные дислокации, всегда являющиеся дипольными структурами (в силу сохранения вектора Бюргерса) и поэтому в масштабе зоны сдвига не несущие избыточный дислокационный заряд, и периферийные дислокационные скопления, явлющиеся заторможенными сдвигообразующими дислокациями и в масштабе зоны сдвига несущие избыточный заряд. Законы накопления плотности этих двух типов дислокаций различны, поскольку плотность внутризонных дислокаций пропорциональна площади зоны сдвига, а периферийных — длине ее периметра. Пусть зона сдвига образована в результате расширения одной дислокационной петли, испущенной источником. При этом произойдет приращение плотности дислокаций $\Delta \rho_i$ вследствие возрастания количества как периферийных, так и внутренних дислокаций. В расчете на единицу объема

$$\Delta \rho_i = \frac{\Gamma_1 D + L_s \Gamma_2 D^2}{V_i},\tag{13}$$

где D — средний диаметр зоны сдвига, Γ_1, Γ_2 — множители, связывающие периметр и площадь зоны сдвига заданной геометрии, L_s — средняя длина внутризонных дислокаций, приходящихся на единицу площади зоны, V_i — объем кристалла, приходящийся на одну зону сдвига.

Величина сдвига, возникшего в результате генерации одной петли, равна $\Delta a_i = b\Delta S$, где ΔS — площадь, заметаемая дислокационной петлей при образовании зоны сдвига ($\Delta S \cong \Gamma_2 D^2 - \chi d^2, \chi d^2$ — площадь, ограниченная внутризонными петлями, d — средний размер петель, оставшихся внутри зоны, χ — геометрический множитель). Тогда, пренебрегая площадью внутризонных петель ($\chi d^2 \ll \Gamma_2 D^2$), получим

$$a_i = b\Gamma_2 D^2 / V_i. \tag{14}$$

Если под $\langle D \rangle$ подразумевать средний размер сдвигообразующих петель, то общий сдвиг, возникающий при расширении *n* петель, будет равен

$$\Delta a = n\Delta a_i = n\Gamma_2 \langle D \rangle^2, \tag{15}$$

изменение плотности дислокаций

$$\Delta \rho = n \Delta \rho_i. \tag{16}$$

Учитывая это, получим скорость накопления дислокаций при образовании зоны сдвига

$$\frac{\Delta\rho}{\Delta a} = \frac{\Gamma_1 \langle D \rangle}{B\Gamma_2 \langle D \rangle^2} + \frac{L}{b} \frac{\langle D \rangle^2}{\langle D \rangle^2} \to \frac{d\rho}{da} = \frac{\Gamma_1}{\Gamma_2 B \langle D \rangle} + \frac{L_s}{b}.$$
 (17)

В работе [10] показано, что $\langle D \rangle = \frac{B}{Gb} \frac{\tau}{\rho}$, где B — константа материала (B = 180 - 1000). Вычислим член,

определяющий накопление внутризонных дислокаций в случае действия механизма КВ. Для этого учтем прежде всего то, что, как показано нами, длина барьеров КВ пропорциональна расстоянию между дислокациями леса. Частота активаций элементарных актов рекомбинации винтовых участков дислокаций длиной l_{cs} по аналогии с [9] может быть записана как $\gamma_s = \nu \frac{b}{l_{cs}} \exp(-U_s/kT)$, где l_{cs} — длина участка дислокации, испытывающего термоактивируемую рекомбинацию, U_s — энергия активации.

Число образовавшихся на единице длины дислокаций за время движения дислокации в зоне сдвига ($\Delta t = D/v$) термоактивируемо рекомбинировавших участков равно

$$K = \Delta t \gamma_s = \frac{D\nu b}{2\upsilon l_{cs}} \exp(-U_s/kT), \qquad (18)$$

где v — средняя скорость движения дислокации в зоне сдвига, D — средний размер зоны сдвига.

Термоактивируемая рекомбинация винтового участка l_{cs} , как показано выше, сопровождается образованием барьера КВ длиной $\sim \rho^{-1/2}$. Тогда, принимая длину дислокации, оставшейся на барьере КВ, равной $2\rho^{-1/2}$, получим, что внутри зоны сдвига будут генерироваться вследствие действия механизма КВ дислокации, общая длина которых равна

$$L_{s} = \frac{\nu b}{v} \frac{w_{s} \Gamma_{1} D^{2}}{l_{cs}^{2}} \rho^{-1/2} \exp(-U_{s}/kT).$$
(19)

Учитывая соотношение (18), получим

$$\frac{\Delta\rho}{\Delta a} = \frac{\Gamma_1}{\Gamma_2 Db} + \frac{\nu w_s \Gamma_1}{l_{cs}^2 v \Gamma_2} \rho^{-1/2} \exp(-U_s/kT).$$
(20)

Учитывая, что $D = \frac{B\tau}{ZGb\rho}$, (Z — число действующих систем скольжения) [10], а $\tau = \tau_F + \alpha Gb\rho^{1/2}$, получим

$$\frac{d\rho}{da} = C_1 \frac{\rho}{\tau} + C_2 \alpha \frac{e^{-U_s/kT}}{\tau - \tau_F},$$
(21)

где

$$C_1 = \frac{\Gamma_1 ZGb}{\Gamma_2 B}, \quad C_2 = \frac{\nu w_s \Gamma_1}{l_{cs}^2 v \Gamma_2} Gb$$

— величины, которые приближенно можно принять за константы, не зависящие от температуры. Тогда соотношение (21) будет описывать интенсивность накопления дислокаций при различных температурах.

Соотношение (21) получено в предположении множественного скольжения, т.е. при допущении, что длина свободного сегмента дислокации и соответственно длина барьера КВ пропорциональны изменяющемуся в процессе деформации расстоянию между дислокациями.

В случае одиночного скольжения в идеализированном случае можно полагать, что плотность дислокаций леса не меняется с деформацией, положив ее равной начальной плотности дислокаций ρ_0 . Тогда после очевидных преобразований получим

$$\frac{d\rho}{da} = C_1 \frac{\rho}{\tau} + C_2^* \exp(-U_s/kT), \qquad (22)$$

где $C_2^* = C_2/Gb\rho_0$.

4. Кривые упрочнения монокристаллов сплавов со сверхструктурой *L*1₂

Учтем, что сопротивление движению дислокаций со стороны дислокационного леса в однородных дислокационных структурах описывается соотношением

$$\tau = \tau_F + \alpha G b \rho^{1/2}. \tag{23}$$

Для сплавов со сверхструктурой $L1_2$ величины τ_F и α могут быть представлены как [1]

$$\tau_F = \tau_0^{(1)} \exp(-U_1/kT) + \tau_0^{(2)} \exp(-U_2/kT),$$

$$\alpha = \alpha_0 - \beta T,$$
(24)

где $au_0^{(1)}, au_0^{(2)}, \, lpha_0, \, eta$ — константы, независимые от температуры, U₁, U₂ — энергии активации самоблокировки винтовых и краевых компонент сверхдислокационных петель. Из (23) следует $\frac{d\tau}{da} = \frac{\alpha G b}{2\sqrt{\rho}} \frac{d\rho}{da}$. Величина $\frac{d\rho}{da}$ была получена нами для множественного и одиночного скольжения в предположении, что единственным механизмом накопления дислокаций является механизм КВ. Однако, как отмечено выше, существенную роль в стабилизации возникающих в процессе движения дислокаций через дислокационный лес барьеров КВ играет подвижность краевых компонент дислокаций: уменьшение подвижности краевых компонент увеличивает число таких сегментов, содержащих барьеры КВ, которые преодолеваются по механизму Орована и, следовательно, увеличивают плотность дислокаций, оставшихся внутри зоны. При этом относительная доля прямолинейных конфигураций уменьшается. Это обстоятельство учтем в соотношении, описывающем накопление дислокаций, добавив интенсивность накопления по аналогии с выше рассмотренным механизмом КВ, принимая во внимание, что энергия активации при этом определяется механизмами диффузии. С учетом этого получим системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{d\rho}{da} = C_1 \frac{\rho}{\tau} + \frac{C_2 e^{-U_1/kT} + C_3 e^{-U_2/kT}}{G b \rho_z^{1/2}}, \\ \frac{d\tau}{da} = \frac{\alpha G b}{2\sqrt{\rho}} \left(C_1 \frac{\rho}{\tau} + \frac{C_2 e^{-U_1/kT} + C_3 e^{-U_2/kT}}{G b \rho_z^{1/2}} \right), \end{cases}$$
(25)

где в случае множественного скольжения $\rho_z = \rho$ — текущей плотности дислокаций, а для одиночного — $\rho_z = \rho_0$ — начальной плотности дислокаций.

Задав начальные условия: $a_0 = 0$, $\tau_0 = \tau_F + \alpha G b \rho_0^{1/2}$ (τ_F и α определяются соотношением (24)), численно решив системы уравнений (24), (25), получим зависимости $\tau(a)$ и $\rho(a)$, которые могут быть сопоставлены с экспериментально наблюдамыми зависимостями для Ni₃Ge [1]. Для решения систем необходимы значения параметров C_1 , C_2 , C_3 , которые определим из следующих соображений. C_1 положим равным значению, характерному для чистых металлов ($C_1 = 6 \cdot 10^4$ Pa [9], $\alpha = 1.8 - 1.8 \cdot 10^{-3}$ T [8]), C_2 и C_3 подберем так, чтобы наилучшим образом описать зависимость скорости накопления дислокаций от деформации, полученной



Рис. 4. Кривые упрочнения монокристаллов Ni₃Ge, ориентированных для множественного и одиночного скольжения. a, b — ось сжатия [100], c, d — ось сжатия [139], a, c — экспериментальные данные, b, d — модельные расчеты. Температуры испытания (K): 1 - 77, 2 - 100, 3 - 293, 4 - 423, 5 - 523, 6 - 673, 7 - 893.

экспериментально для Ni₃Ge в ориентации [100] при 523 K [8] ($C_2 = 5 \cdot 10^{16} \text{ Pa} \cdot \text{m}^{-2}$, $C_3 = 10^{23} \text{ Pa} \cdot \text{m}^{-2}$). Примем G = 80 GPa, $b = 2.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, $\rho_0 = 10^{10} \text{ m}^{-2}$.

Значения энергий активации U_1 , U_2 и величин предэкспоненциальных множителей $(\tau_0^{(1)}, \tau_0^{(2)})$ в соотношении (24) примем равными экспериментально определенным из зависимости предела текучести от температуры для монокристаллов Ni₃Ge в ориентации [100]: $U_1 = 0.01$ eV, $U_2 = 0.07$ eV, $\tau_0^{(1)} = 300$ MPa, $\tau_0^{(2)} = 700$ MPa [1]. Чтобы проследить характер влияния ориентации кристаллов, связанного с количеством систем скольжения, осуществляющих деформацию монокристаллов, величины использумых параметров оставим одинаковыми как в случае множественного, так и в случае одиночного скольжения. Остановимся на сопоставлении результатов расчетов с экспериментально наблюдаемыми закономерностями термического и деформационного упрочнения монокристаллов Ni₃Ge.

Результаты численного интегрирования системы (25) представлены на рис. 4, b. Здесь же для сопоставления на рис. 4, a приведены экспериментальные кривые $\tau(\varepsilon)$. Как следует из рис. 4, система уравнений (25) верно описывает экспериментально наблюдаемые особенности изменения кривых деформации [1–3].

Однако при внимательном сопоставлении экспериментальных и расчетных кривых обнаруживается количественное расхождение, в особенности в высокотемпературной области. Укажем возможные пути улучшения согласия между модельными расчетами и экспериментом.

В высокотемпературной области интенсивность накопления дислокаций велика, так что плотности $\sim 10^{15}$ m⁻² достигаются уже при невысоких деформациях. Очевидно, что при таких плотностях дислокаций необходимо учитывать аннигиляцию дислокаций даже в условиях малой подвижности дислокаций в сверхструктурах $L1_2$. Другой фактор, который необходимо учитывать, — зависимость энергий активации от напряжений и ориентации оси деформации, на что неоднократно указывалось рядом авторов [11].

Несмотря на указанные недостатки феноменологической модели, представленной системой дифференциальных уравнений (25), можно полагать, что изложенные выше соображения отражают основные черты формирования дислокационной структуры и термического упрочнения в сплавах с L1₂-сверхструктурой.

Список литературы

- В.А. Старенченко, Ю.В. Соловьева, Ю.А. Абзаев, В.И. Николаев, В.В. Шпейзман, Б.И. Смирнов. ФТТ **38**, *10*, 3050 (1996).
- [2] Ю.А. Абзаев, В.А. Старенченко, Н.А. Конева. Изв. вузов. Физика, 3, 65 (1987).
- [3] В.А. Старенченко, Ю.В. Соловьева, Ю.А. Абзаев, Э.В. Козлов, В.В. Шпейзман, В.И. Николаев, Б.И. Смирнов. ФТТ 40, 4, 672 (1998).
- [4] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Мир, М. (1972).
 402 с.
- [5] Б.А. Гринберг, М.А. Иванов, Ю.Н. Горностырев. ФММ 46, 4, 812 (1978).
- [6] Б.А. Гринберг, В.И. Сюткина. Новые методы упрочнения упорядоченных сплавов. Металлургия, М. (1985). 176 с.
- [7] Ж. Фридель. Дислокации. Мир, М. (1967). 643 с.
- [8] В.А. Старенченко, Ю.А. Абзаев, Л.Г. Чернов. Металлофизика 2, 12, 22 (1987).
- [9] Л.Е. Попов, В.С. Кобытев, Т.А. Ковалевская. Пластическая деформация сплавов. Металлургия, М. (1984). 182 с.
- [10] С.Н. Колупаева, В.А. Старенченко, Л.Е. Попов. Неустойчивости пластической деформации кристаллов. Изд-во Том. ун-та, Томск (1994). 301 с.
- [11] F.E. Heredia, D.P. Pope. Acta Mater. 39, 6, 2027 (1991).