

Моделирование процесса деформационного разрушения дальнего порядка в сплавах со сверхструктурой $L1_2$

© В.А. Старенченко, О.Д. Пантюхова, С.В. Старенченко

Томский государственный архитектурно-строительный университет,
634003 Томск, Россия

E-mail: dekan@oof.tisi.tomsk.su

(Поступила в Редакцию 15 марта 2001 г.
В окончательной редакции 31 августа 2001 г.)

Рассмотрено разрушение дальнего атомного порядка в сплавах со сверхструктурой $L1_2$, вызываемое пластической деформацией. Построена математическая модель, в которой учтены следующие механизмы, приводящие к разрушению дальнего порядка: генерация сверхдислокаций; генерация одиночных дислокаций; размножение антифазных границ при консервативном движении дислокаций; размножение антифазных границ при переползании дислокаций; образование трубок антифазных границ на сверхдислокациях; генерация точечных дефектов, а также термическое упорядочение. Сформулирована математическая модель деформационного упрочнения и разрушения дальнего атомного порядка с учетом смены типа сдвигообразующих дислокаций от сверхструктурных к одиночным.

Работа выполнена при поддержке гранта INTAS N 97-31994.

Пластическая деформация сплавов может сопровождаться изменениями как дефектности кристаллической решетки, так и фазового состояния сплава. Экспериментальные исследования состояния сплавов со сверхструктурой $L1_2$, подвергнутых пластической деформации в различных условиях (одноосной деформации, прокатке, измельчению в шаровых мельницах), показали изменения степени дальнего порядка в этих сплавах. На это указывали как косвенные данные по изменению дислокационной субструктуры [1], магнитных свойств сплавов [2], так и прямые измерения степени дальнего порядка рентгеноструктурными методами [3–5]. Подробные исследования закономерностей изменения дальнего порядка рентгеноструктурными методами были проведены недавно для различных сплавов с дальним порядком в работах [6–10].

Для объяснения явления разрушения дальнего порядка под воздействием пластической деформации рассмотрен ряд механизмов [7,11], связанных с движением и накоплением деформационных дефектов.

В наших работах [12–14] были построены частные модели разрушения дальнего порядка, связанного с накоплением сверхдислокаций [12]; с генерацией антифазных границ (АФГ) движущимися дислокациями [13]; генерацией трубок АФГ; генерацией деформационных точечных дефектов [13,14]; с переползанием краевых дислокаций [13,15].

Настоящая работа представляет попытку построения модели, объясняющей все перечисленные частные механизмы, в единую математическую модель.

Недавние экспериментальные исследования указывают на гетерогенный характер вызванного деформацией фазового перехода порядок–беспорядок [7–10]. Учету этого обстоятельства посвящена заключительная часть работы, где строится модель разрушения дальнего порядка, учитывающая переход от движения сверхдислокаций к движению одиночных дислокаций.

1. Механизмы разрушения дальнего атомного порядка

Из экспериментальных работ следует, что в процессе пластической деформации упорядоченных сплавов накопление деформационных дефектов приводит к понижению степени упорядоченности материала [3–10], которое сопровождается увеличением площади АФГ [6–10] и появлением областей разупорядоченной фазы.

Понижение среднего по объему материала параметра дальнего порядка η при возрастании степени деформации ε и возникновение разупорядоченной фазы могут быть обусловлены следующими факторами.

Во-первых, происходит нарушение дальнего атомного порядка в объеме антифазных доменов за счет взаимной аннигиляции точечных дефектов, генерируемых при деформации сплава в результате неконсервативного волочения порогов сдвигообразующими дислокациями винтовой ориентации.

Изменение параметра дальнего порядка внутри антифазных доменов, обусловленное взаимной аннигиляцией точечных дефектов, как показано далее, можно записать в виде

$$\frac{d\eta_*}{d\varepsilon} = -\eta_* \frac{1}{\varepsilon} \mu_r D_0 \exp(-E_i^m/kT) C_i C_v, \quad (1)$$

где $\dot{\varepsilon}$ — скорость деформации, μ_r — не зависящий от температуры коэффициент рекомбинации, D_0 — предэкспоненциальный множитель, E_i^m — энергия активации миграции межузельного атома, k — постоянная Больцмана, T — температура деформирования. C_i , C_v — концентрации межузельных атомов и вакансий. Здесь $\frac{1}{\varepsilon} \mu_r D_0 \exp(-E_i^m/kT) C_i C_v$ определяет количество точечных дефектов, которые взаимно аннигилируют внутри антифазных доменов [13].

Во-вторых, увеличение вследствие деформации площади АФГ, имеющих ненулевую толщину, вызывает понижение параметра дальнего порядка.

Интенсивность изменения среднего значения параметра дальнего порядка, регистрируемого по рассеянию рентгеновского излучения, с деформацией может быть представлена в виде [13]

$$\frac{d\eta}{d\varepsilon} = -\frac{1}{2\eta} \eta_*^2 (1 - k_0^2) \delta \frac{dS^*}{d\varepsilon}. \quad (2)$$

Здесь η_* — средняя степень дальнего порядка внутри антифазного домена, $k_0 \in (0, 1)$ — константа, определяемая законом изменения параметра дальнего порядка на АФГ, δ — толщина АФГ (величина их размытия), S^* — площадь АФГ в единице объема кристалла.

Из соотношения (2) видно, что интенсивность изменения параметра дальнего порядка определяется интенсивностью накопления площади АФГ и степенью порядка внутри антифазного домена. Таким образом, изменение в процессе деформации параметра дальнего порядка, связанное с изменением степени дальнего порядка внутри антифазных доменов и с интенсивностью накопления площади АФГ, будет описываться уравнениями (1) и (2).

Следует отметить, что изменение площади АФГ происходит по разным причинам: к увеличению площади АФГ может приводить накопление как сверхструктурных, так и одиночных дислокаций. Консервативное движение сдвигобразующих дислокаций при пересечении АФГ создает ступеньки АФГ. Образование трубок АФГ вследствие консервативного движения порогов вдоль винтовых сверхдислокаций способствует накоплению АФГ. Кроме того, часть накапливаемых в процессе пластической деформации межузельных атомов и вакансий аннигилирует на дислокациях, вызывая тем самым их переполнение, в результате чего увеличивается общая площадь АФГ в деформируемом материале. Все перечисленные механизмы связаны с дислокациями, генерируемыми при деформации.

Известно [1], что при определенных условиях в деформируемых сплавах со сверхструктурой $L1_2$ происходит смена типа сдвигобразующих дислокаций от сверхструктурных к одиночным. В зависимости от того, какие дислокации (одиночные или сверхструктурные) при степени деформации ε являются носителями сдвига, реализуются те или иные механизмы разрушения дальнего атомного порядка.

1.1. Условие смены типа сдвигобразующих дислокаций. Накопление сверхдислокаций в деформируемом упорядоченном материале будет происходить до тех пор, пока сопротивление движению сверхдислокаций не станет больше сопротивления движению одиночных дислокаций, т.е. пока не выполнится условие [16]

$$\frac{\xi}{b} < (\alpha_2 - \alpha_1) G b \rho^{1/2} + \tau_f, \quad (3)$$

где ξ — энергия АФГ, b — модуль вектора Бюргерса, α_1 и α_2 — параметры, характеризующие интенсивность

взаимодействия одиночных и сверхструктурных сдвигобразующих дислокаций с дислокациями леса, G — модуль сдвига, ρ — плотность дислокаций, τ_f — напряжение трения, определяемое образованием барьеров Кира–Вильсдорф на винтовых и осаждением точечных дефектов на краевых дислокациях [17]. Параметры, описывающие сдвиговые процессы при скольжении одиночных дислокаций, будем отмечать индексами I и I, а аналогичные параметры для сверхструктурных дислокаций — индексами 2 и II. При выполнении условия (3) начнут работу дислокационные источники, испускающие одиночные дислокации.

В упорядоченных материалах энергия АФГ может быть определена как некоторая эффективная энергия АФГ $\xi = \xi_0 \eta^2$, где ξ_0 — энергия АФГ в полностью упорядоченном материале [1].

В дальнейшем будем предполагать, что энергия АФГ различного типа зависит от эффективного параметра дальнего порядка, который определяется всеми рассматриваемыми в настоящей работе механизмами деформационного разрушения дальнего атомного порядка. Таким образом, условие, определяющее тип сдвигобразующих дислокаций, будет зависеть от эффективного параметра дальнего порядка следующим образом:

$$\frac{\xi_0 \eta^2}{b} < (\alpha_2 - \alpha_1) G b \rho^{1/2} + \tau_1. \quad (4)$$

1.2. Механизмы разрушения дальнего атомного порядка, связанные с движением сверхдислокаций. Получим уравнение, определяющее изменение параметра дальнего порядка в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ в процессе пластической деформации при условии, что в деформируемом материале работают только источники, испускающие сверхдислокации. В этом случае имеют место все ранее перечисленные деформационные механизмы разрушения дальнего атомного порядка.

1) Интенсивность накопления площади АФГ в результате генерации сверхдислокаций. Пусть в упорядоченном материале генерируются сверхдислокации. Тогда параметр дальнего порядка будет уменьшаться вследствие накопления АФГ, обусловленного увеличением количества сверхдислокаций. Площадь АФГ в единице объема в случае работы сверхдислокационных источников прямо пропорциональна длине дислокаций и их ширине (расстоянию между сверхчастичными дислокациями): $S^* = \rho h$, где ρ — плотность сверхдислокаций, $h = G b^2 / 2\pi \xi_0 \eta^2$ — ширина сверхдислокаций.

Степень расщепленности сдвигобразующих сверхдислокаций (их ширина) определяется эффективной энергией АФГ и, следовательно, зависит от степени упорядоченности деформируемого материала (от эффективного параметра дальнего порядка). Ранее [12,13] мы предполагали, что расщепленность сверхдислокаций не зависит от наличия АФГ в материале. При сделанных нами предположениях [12,13] на расстояние меж-

ду сверхчастичными дислокациями влияло наличие деформационных точечных дефектов, которые случайным образом взаимно аннигилировали, понижая тем самым дальний атомный порядок в объеме деформируемого сплава. Далее будем полагать, что на расщепленность сверхдислокаций влияют как наличие и накопление точечных дефектов, так и наличие и накопление АФГ, т.е. расстояние между сверхчастичными дислокациями будет зависеть от эффективного параметра дальнего порядка. В этих предположениях интенсивность накопления площади АФГ в результате генерации сверхдислокаций $dS_{(1)}^*/d\varepsilon$ может быть записана в виде

$$\frac{dS_{(1)}^*}{d\varepsilon} = \frac{Gb^2}{2\pi\xi_0\eta^2} \left[\frac{d\rho_{II}}{d\varepsilon} - 2\rho \frac{1}{\eta} \frac{d\eta_{II}}{d\varepsilon} \right]. \quad (5)$$

2) Интенсивность накопления площади АФГ в результате пересечения АФГ движущимися сверхдислокациями. Сверхдислокации при консервативном движении могут пересекать междоменные АФГ, в результате чего на последних возникают ступеньки. Происходит увеличение общей площади АФГ. В этом случае для площади АФГ было получено соотношение, описывающее наибольшую из возможных интенсивностей накопления АФГ $dS_{(2)}^*/d\varepsilon$ [13]

$$\frac{dS_{(2)}^*}{d\varepsilon} = \frac{1}{d_0\chi} \exp\left(\frac{\varepsilon}{\omega\chi}\right), \quad (6)$$

где d_0 — начальный средний размер антифазных доменов, ω — константа, определяющая форму антифазных доменов, χ — фактор Шмида.

3) Интенсивность накопления площади АФГ при образовании трубок АФГ. Образование трубок АФГ вследствие консервативного движения порогов вдоль сверхдислокаций винтовой ориентации наряду с предыдущими механизмами приводит к увеличению общей площади АФГ. Для этого случая уравнение, описывающее накопление площади АФГ, получено в виде [13]

$$\frac{dS_{(3)}^*}{d\varepsilon} = \frac{1-t_1}{2\Gamma b\chi} \left[4b + \frac{Gb^2}{\pi\xi_0\eta^2} \right] \rho^{1/2}, \quad (7)$$

где t_1 — доля порогов, генерирующих точечные дефекты, Γ — множитель, учитывающий форму зоны сдвига.

Поскольку трубки АФГ образуются в результате консервативного движения краевых порогов вдоль сдвигающих дислокаций винтовой ориентации, интенсивность накопления площади АФГ пропорциональна плотности дислокаций и доле порогов, генерирующих АФГ, и определяется периметром трубок АФГ. С учетом того факта, что расщепленность сверхдислокаций обусловлена степенью деформации, периметр трубок АФГ будет зависеть от эффективного параметра дальнего порядка.

4) Интенсивность накопления площади АФГ вследствие переползания краевых

дислокаций. Интенсивность накопления площади АФГ в единице объема деформируемого материала, обусловленная переползанием краевых сверхдислокаций $dS_{(4)}^*/d\varepsilon$, может быть представлена в виде [13]

$$\frac{dS_{(4)}^*}{d\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{a_l^3 D_0}{\chi k T b} \left[\exp(-E_i^m/kT) C_i + \exp(-E_v^m/kT) C_v \right] \tau_2 \rho \theta, \quad (8)$$

где a_l — параметр решетки, E_v^m — энергия активации миграции вакансии, τ_2 — деформирующее напряжение в случае генерации сверхдислокаций, θ — доля краевых дислокаций.

Таким образом, общее увеличение площади АФГ при деформировании упорядоченных по типу $L1_2$ сплавов определяется действием всех перечисленных выше механизмов. Интенсивность накопления площади АФГ различного типа в единице объема кристалла в случае работы сверхдислокационных источников может быть представлена в приближении линейного суммирования в виде

$$\frac{dS_{II}^*}{d\varepsilon} = \frac{dS_{(1)}^*}{d\varepsilon} + \frac{dS_{(2)}^*}{d\varepsilon} + \frac{dS_{(3)}^*}{d\varepsilon} + \frac{dS_{(4)}^*}{d\varepsilon}. \quad (9)$$

Соответственно уравнение, описывающее изменение эффективного параметра дальнего порядка, в случае работы сверхдислокационных источников будет иметь вид

$$\frac{d\eta_{II}}{d\varepsilon} = \frac{-2\pi\xi_0\delta(1-k_0^2)\eta_*^2\eta^4}{4\pi\xi\eta_0^5 - 2\delta Gb^2(1-k_0^2)\rho\eta_*^2} \frac{dS_{II}^*}{d\varepsilon}. \quad (10)$$

5) Разрушение дальнего атомного порядка деформационными точечными дефектами. При движении дислокаций с пороговыми возмущениями возможна генерация как вакансий, так и межузельных атомов [1,18], что в упорядоченных сплавах может приводить к уменьшению степени дальнего порядка. Данное обстоятельство связано с тем, что вероятности осаждения межузельных атомов на вакантные узлы обычно мало зависят от того, к какой подрешетке принадлежит вакантный узел и к какому сорту относится межузельный атом, поскольку энергия, выделяемая при аннигиляции межузельного атома с вакансией, значительно превосходит энергию упорядочения. В связи с этим в первом приближении можно считать, что осаждение межузельных атомов на вакантные узлы носит случайный характер. В работе [13] было показано, что интенсивность изменения параметра дальнего порядка в объеме деформируемого материала, обусловленного взаимной аннигиляцией точечных дефектов, имеет вид

$$\frac{d\eta}{da} = -\eta \frac{dC_i}{da}. \quad (11)$$

Здесь dC_i/da определяет количество межузельных атомов в единице объема, осевших за единицу времени на вакантные места.

Предположим, что интенсивность взаимной аннигиляции точечных дефектов внутри антифазных доменов пропорциональна их концентрациям: $k_i C_i C_v$. Коэффициент пропорциональности k_i может быть связан с коэффициентом диффузии D_i межузельных атомов следующим соотношением [19]: $k_i = D_i \mu_r$. Учитывая, что $D_i = D_0 \exp(-E_i/kT)$, интенсивность изменения параметра дальнего порядка внутри антифазного домена, обусловленного взаимной аннигиляцией точечных дефектов, можно записать в виде

$$\frac{d\eta}{da} = -\eta \frac{1}{\dot{\epsilon}} \mu_r D_0 \exp(-E_v^m/kT) C_i C_v. \quad (12)$$

1.3. Разрушение дальнего атомного порядка, связанное с движением одиночных дислокаций. В случае работы источников, испускающих одиночные дислокации, возникновения трубок АФГ происходить не будет, поскольку трубки АФГ образуются только сверхдислокациями. Площадь АФГ, накапливаемых в результате генерации источниками одиночных дислокаций, определяется площадью, заметаемой одиночной дислокацией при ее скольжении. В этом случае в предположении, что одиночные дислокации движутся независимо друг от друга, $dS^*/d\epsilon = 1/\chi b$.

Интенсивность изменения площади АФГ различного типа, обусловленная действием всех механизмов разрушения дальнего атомного порядка, при условии, что работают источники одиночных дислокаций, может быть записана как

$$\frac{dS_1^*}{d\epsilon} = \frac{1}{\dot{\epsilon}} \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T b} [\exp(-E_i^m/kT) C_i + \exp(-E_v^m/kT) C_v] \tau_1 \rho \theta + \frac{1}{\chi b}, \quad (13)$$

где τ_1 — деформирующее напряжение в случае генерации одиночных дислокаций. Уравнение, описывающее изменение эффективного параметра дальнего порядка, будет иметь вид

$$\frac{d\eta_1}{d\epsilon} = -\frac{1}{2\eta} \eta_*^2 (1 - k_0^2) \delta \left\{ \frac{1}{\dot{\epsilon}} \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T b} [\exp(-E_i^m/kT) C_i + \exp(-E_v^m/kT) C_v] \tau_1 \rho \theta + \frac{1}{\chi b} \right\}. \quad (14)$$

2. Модель кинетики деформационного упорядочения и разрушения дальнего порядка

Получим уравнения баланса деформационных дефектов в случае работы сверхдислокационных источников и источников, испускающих одиночные дислокации. Уравнение, описывающее накопление сверхдислокаций в процессе пластической деформации, может быть записано в

виде [18,20]

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{II}}{d\epsilon} = C_1 \frac{(\alpha G b)^2 \rho}{\tau_2} + \frac{C_2 e^{-U_1/kT} + C_3 e^{-U_2/kT}}{G b \rho^{1/2}} \\ - \frac{1}{\dot{\epsilon}} \min(r_a, [\theta \rho]^{-1/2}) \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T b} [\exp(-E_i/kT) C_i \\ + \exp(-E_v/kT) C_v] \tau_2 \rho^2 \theta^2, \end{aligned} \quad (15)$$

где $r_a = \frac{G b}{4\pi(\tau_f^0 + \tau_f)} \frac{(2-\nu)}{(1-\nu)}$ — эффективный радиус захвата сверхдислокаций при их аннигиляции, τ_f^0 — напряжение трения, связанное с преодолением барьера Пайерлса, ν — коэффициент Пуассона. Первые два слагаемых в уравнении (15) представляют собой интенсивность генерации сверхдислокаций, определяющуюся интенсивностью накопления сверхдислокаций по периферии зоны сдвига (первое слагаемое) и интенсивностью образования барьеров Кира–Вильсдорф внутри зоны сдвига (второе слагаемое). Аннигиляция сверхдислокаций происходит в результате переползания их краевых компонент; скорость аннигиляции определяется последним слагаемым в уравнении (15). Смысл параметров, входящих в (15), подробно изложен в [18,20]. Авторы полагают, что аннигиляция краевых дислокаций возможна в том случае, если дислокации находятся друг от друга на расстоянии, при котором сила взаимодействия между ними превышает напряжение трения ($\tau_f^0 + \tau_f$). Расстояние между такими дислокационными сегментами определяется эффективным радиусом захвата r_a [18,20]. При высокой плотности дислокаций, когда расстояние между дислокациями меньше r_a , можно предположить, что расстояние между дислокационными сегментами, способными аннигилировать, равно среднему расстоянию между ними $[\theta \rho]^{-1/2}$. Таким образом, расстояние между дислокациями, при котором возможна аннигиляция краевых дислокаций, может быть определено как меньшее из значений r_a или $[\theta \rho]^{-1/2}$, которое в формуле (15) обозначено как $\min(r_a, [\theta \rho]^{-1/2})$.

При выполнении условия (4) в деформируемом материале начнут работу источники, испускающие одиночные дислокации. В этом случае интенсивность генерации одиночных дислокаций будет определяться интенсивностью их накопления на границе зоны сдвига. Образование барьеров Кира–Вильсдорф происходить не будет, поскольку этот процесс имеет место только при движении сверхдислокаций. Скорость аннигиляции одиночных дислокаций может быть получена таким же образом, как и для сверхдислокаций, но только с учетом того, что в данном случае эффективный радиус захвата одиночных дислокаций определяется как $r_a^* = \frac{G b}{4\pi(\tau_f^0 + \dot{\epsilon}_0 \eta^2/b)} \frac{(2-\nu)}{(1-\nu)}$.

Таким образом, уравнение, описывающее накопление одиночных сдвигообразующих дислокаций, будет иметь вид

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_I}{d\epsilon} = C_1 \frac{(\alpha G b)^2 \rho}{\tau_1} - \frac{1}{\dot{\epsilon}} \min(r_a^*, [\theta \rho]^{-1/2}) \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T b} \\ \times [\exp(-E_i/kT) C_i + \exp(-E_v/kT) C_v] \tau_1 \rho^2 \theta^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Уравнения баланса деформационных точечных дефектов записываются следующим образом:

$$\frac{dC_i}{d\varepsilon} = \frac{1}{30 \dots 60} p_j \xi B \frac{\tau}{G} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T} \exp(-E_i/kT) C_i \tau \rho \theta - \frac{1}{\varepsilon} \mu_r D_0 \exp(-E_i/kT) C_i C_v, \quad (17)$$

$$\frac{dC_v}{d\varepsilon} = \frac{1}{30 \dots 60} p_j \xi B \frac{\tau}{G} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{a_i^3 D_0}{\chi k T} \exp(-E_v/kT) C_i \tau \rho \theta - \frac{1}{\varepsilon} \mu_r D_0 \exp(-E_i/kT) C_i C_v. \quad (18)$$

В этих соотношениях первый член описывает генерацию точечных дефектов движущимися дислокациями [21], второй — их аннигиляцию на дислокациях [18], третий — взаимную аннигиляцию точечных дефектов.

Уравнения (17), (18) в случае накопления сверхструктурных и одиночных дислокаций будут различаться выражениями для деформирующего напряжения, которые представим соответственно в виде

$$\tau_2 = \tau_f^0 + \tau_f + \alpha_2 G b \rho^{1/2}, \quad (19)$$

$$\tau_1 = \tau_j^0 + \frac{\xi_0 \eta^2}{b} + \alpha_1 G b \rho^{1/2}. \quad (20)$$

Формулы (1), (10), (15), (17)–(19) и (1), (14), (16)–(18), (20) представляют собой математические модели кинетики упрочнения и разрушения дальнего атомного порядка в случае работы сверхдислокационных источников и источников, испускающих одиночные дислокации соответственно.

Введем функцию ψ , учитывающую смену типа носителя сдвига, следующим образом:

$$\psi = \begin{cases} 1, & \frac{\xi_0 \eta^2}{b} \geq (\alpha_2 - \alpha_1) G b \rho^{1/2} + \tau_f, \\ 0, & \frac{\xi_0 \eta^2}{b} < (\alpha_2 - \alpha_1) G b \rho^{1/2} + \tau_f. \end{cases} \quad (21)$$

Математическая модель упрочнения и разрушения дальнего атомного порядка с учетом смены типа сдвигообразующих дислокаций от сверхструктурных к одиночным может быть записана в виде

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = \frac{d\rho_{II}}{d\varepsilon} \psi + \frac{d\rho_I}{d\varepsilon} (1 - \psi), \quad (22)$$

$$\frac{dC_i}{d\varepsilon} = \frac{dC_{iII}}{d\varepsilon} \psi + \frac{dC_{iI}}{d\varepsilon} (1 - \psi), \quad (23)$$

$$\frac{dC_v}{d\varepsilon} = \frac{dC_{vII}}{d\varepsilon} \psi + \frac{dC_{vI}}{d\varepsilon} (1 - \psi), \quad (24)$$

$$\frac{d\eta}{d\varepsilon} = \frac{d\eta_{II}}{d\varepsilon} \psi + \frac{d\eta_I}{d\varepsilon} (1 - \psi), \quad (25)$$

$$\tau = \tau_{II} \psi + \tau_I (1 - \psi). \quad (26)$$

Экспериментальные данные показывают, что уже при небольших степенях деформации наблюдаются одиночные дислокации, доля которых возрастает с деформацией [22]. Данный факт указывает на то, что в сплаве уже при небольших деформациях существуют области, которые деформируются как разупорядоченный материал. Об этом же свидетельствуют результаты рентгеноструктурных исследований [6–10]. Поэтому предположим, что в деформируемом кристалле, первоначально упорядоченном, вследствие гетерогенного перехода порядок–беспорядок [6–10] возникает разупорядоченная фаза. Долю оставшейся упорядоченной фазы обозначим как $C^*(\varepsilon)$. В общем случае вид зависимости $C^*(\varepsilon)$ неизвестен, однако экспериментальные исследования [10] указывают на то, что в хорошем приближении она может быть представлена линейной зависимостью $C^*(\varepsilon) = 1 - \varepsilon/\varepsilon_k$. Здесь ε_k — критическая степень деформации, при которой сплав переходит в полностью разупорядоченное состояние. Степень деформации ε_k определим из численных расчетов системы дифференциальных уравнений (22)–(26) как соответствующую значению деформации, при котором параметр дальнего порядка обращается в нуль. При сделанных предположениях система уравнений баланса дефектов и деформационного упрочнения $L1_2$ -сплавов, учитывающая гетерогенный фазовый переход порядок–беспорядок, может быть представлена в виде

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = \frac{d\rho_{II}}{d\varepsilon} C^* + \frac{d\rho_I}{d\varepsilon} (1 - C^*), \quad (27)$$

$$\frac{dC_i}{d\varepsilon} = \frac{dC_{iII}}{d\varepsilon} C^* + \frac{dC_{iI}}{d\varepsilon} (1 - C^*), \quad (28)$$

$$\frac{dC_v}{d\varepsilon} = \frac{dC_{vII}}{d\varepsilon} C^* + \frac{dC_{vI}}{d\varepsilon} (1 - C^*), \quad (29)$$

$$\frac{d\eta}{d\varepsilon} = \frac{d\eta_{II}}{d\varepsilon} C^* + \frac{d\eta_I}{d\varepsilon} (1 - C^*), \quad (30)$$

$$\tau = \tau_{II} C^* + \tau_I (1 - C^*). \quad (31)$$

Известно, что в процессе пластической деформации в упорядоченных сплавах при повышенных температурах в результате больших концентраций точечных дефектов может происходить восстановление дальнего атомного порядка. Анализ различных кинетических моделей термического упорядочения сплавов проведен в работе [23]. Кинетика атомного упорядочения в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ на основе миграции деформационных вакансий описана моделью Зи–Уилкиса, согласно которой скорость упорядочения имеет вид [23]

$$\frac{d\eta}{dt} = 21 v_d C_v \exp(-E_v^m/kT) \{ 3(1 - \eta)^2 - \exp(-V_0 \eta/kT) [16\eta + 3(1 - \eta)^2] \}, \quad (32)$$

где V_0 — энергия упорядочения.

С учетом процесса восстановления дальнего атомного порядка формулу (30) запишем в следующем виде:

$$\frac{d\eta}{d\varepsilon} = \frac{d\eta_{II}}{d\varepsilon} C^* + \frac{d\eta_I}{d\varepsilon} (1 - C^*) + \frac{1}{\varepsilon} 21\nu_d C_v \exp(-E_v^m/kT) \{3(1 - \eta)^2 - \exp(-V_0\eta/kT)[16\eta + 3(1 - \eta)^2]\}. \quad (33)$$

Система уравнений (1), (27)–(29), (31), (33) представляет модель изменения эффективного параметра дальнего порядка с учетом перехода от движения одиночных к движению сверхструктурных дислокаций, а также модель кинетики деформационного упрочнения сплавов со сверхструктурой $L1_2$.

3. Численная реализация модели

В рамках модели были проведены расчеты зависимостей степени дальнего порядка от деформации $\eta(\varepsilon)$, кривых упрочнения $\tau(\varepsilon)$, плотностей дислокаций $\rho(\varepsilon)$, концентраций точечных дефектов $C_k(\varepsilon)$. Расчеты проводились для сплавов с высокой энергией АФГ (для этого использовались параметры, характерные для сплава Ni_3Ge) и сплавов с низкой энергией АФГ (в этом случае брались параметры, характерные для сплава Ni_3Fe).

Значения параметров, необходимые для решения системы уравнений (1), (25)–(27), (29), (31), для сплава Ni_3Ge были приняты равными [20,24]: $C_1 = 6 \cdot 10^4 \text{ N/m}^2$, $C_2 = 5 \cdot 10^{16} \text{ N/m}^4$, $C_3 = 10^{23} \text{ N/m}^4$, $U_1 = 0.0094 \text{ eV}$, $U_2 = 0.72 \text{ eV}$, $\tau_0^{(1)} = 300 \text{ MPa}$, $\tau_0^{(2)} = 1700 \text{ MPa}$, $\chi = 0.48$, $\alpha_0 = 1.9$, $\beta = 1.8 \cdot 10^{-3}$, $\tau_f^0 = 50 \text{ MPa}$, $G = 8 \cdot 10^{10} \text{ N/m}^2$, $b = 2.5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, $\alpha_1 = 0.7\alpha_2$, $p_j = 0.5$, $\xi = 0.5$, $B = 340$, $\eta_0 = 1$, $k_0 = 0.5$, $\delta = 0.5 \text{ nm}$, $\xi_0 = 0.2 \text{ J/m}^2$.

Параметры для Ni_3Fe были взяты из работы [25]: $\xi_0 = 0.05 \text{ J/m}^2$, $\tau_f^0 = 42 \text{ MPa}$, $\alpha_0 = 1.2$, $\beta = 4.2 \cdot 10^{-4}$.

Результаты численных расчетов с начальными условиями $\rho(0) = 10^{10} \text{ m}^{-2}$, $C_i(0) = \exp(-E_i^0/kT)$, $C_v(0) = \exp(-E_v^0/kT)$, где E_i^0 , E_v^0 — энергии образования межузельного атома и вакансии соответственно, $\eta_*(0) = 1$, $\eta(0) = 1$ приведены на рис. 1–4.

1) Сплавы с низкой энергией упорядочения. На рис. 1 представлена зависимость параметра дальнего порядка от деформации для различных температур испытания, рассчитанная для сплава Ni_3Fe . Из этого рисунка видно, что параметр дальнего порядка в низкотемпературной и умеренной областях (77–423 К) практически не зависит от температуры и определяется степенью деформации, достигая нуля при относительных деформациях порядка 30–40%. В области повышенных температур в деформируемом материале наблюдается восстановление дальнего атомного порядка. Так, при 573 К дальний порядок начинает восстанавливаться при степени деформации, равной 25%, эффективный параметр дальнего порядка сначала увеличивается (происходит частичное упорядочение материала до 38% от-

носительной деформации), затем остается практически неизменным, и начиная с 50% наблюдается медленное уменьшение параметра дальнего порядка с деформацией.

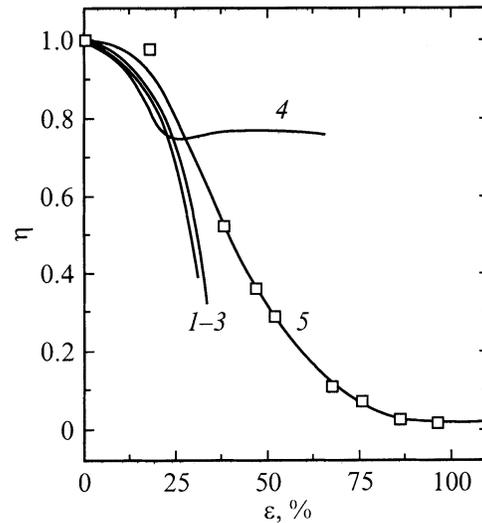


Рис. 1. Зависимость эффективного параметра дальнего порядка от деформации при температурах испытания, равных 77 (1), 293 (2), 423 (3) и 573 К (4) в сплаве Ni_3Fe ; 5 — экспериментальная кривая для Ni_3Fe при комнатной температуре, полученная рентгеноструктурными исследованиями в работах [26,27].

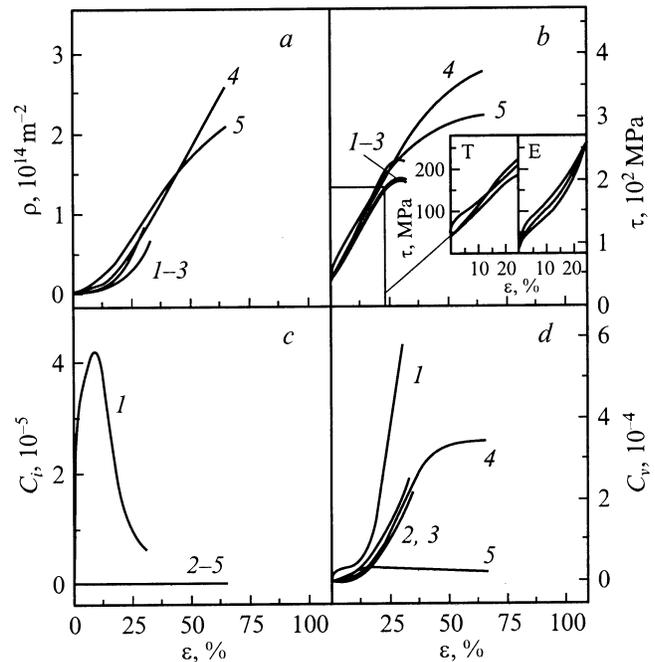


Рис. 2. Зависимость плотности дислокаций (а) деформирующего напряжения (b), концентрации точечных дефектов — межузельных атомов (с) и вакансий (d) — от деформации для различных температур испытания в сплаве Ni_3Fe . T, K : 1 — 77, 2 — 293, 3 — 423, 4 — 573, 5 — 673. На вставке приведено сопоставление экспериментальных (E) зависимостей деформирующего напряжения τ от степени деформации ε для сплава Ni_3Fe [28] с рассчитанными из модели (T).

Кривая 5 на рис. 1 представляет экспериментальные измерения дальнего атомного порядка, полученные на монокристаллах Ni_3Fe , деформированных прокаткой при 293 К [26,27]. Сравнение с расчетами показывает удовлетворительное согласие до деформаций 30–40%. Существенное расхождение при более высоких деформациях может быть обусловлено прежде всего особенностями ближнего порядка в этом сплаве, т.е. трудностями методического характера, связанными с экспериментальным разделением эффектов рассеяния рентгеновского излучения дальним и ближним порядком при степенях порядка $\eta < 0.2$. Поэтому сравнение экспериментальной кривой $\eta(\varepsilon)$ при деформациях $\varepsilon > 30\text{--}40\%$ с расчетами не имеет смысла без введения в модель параметров, характеризующих состояние ближнего порядка.

Зависимость плотности дислокаций от деформации и кривые упрочнения для сплава Ni_3Fe приведены на рис. 2, *a, b*. На вставке к рис. 2, *b* представлено сопоставление теоретических и экспериментальных [28] кривых упорядочения для Ni_3Fe .

На рис. 2, *c, d* представлены зависимости концентраций точечных дефектов (межузельных атомов и вакансий) от степени деформации для различных температур деформирования. Из этих рисунков видно, что с увеличением температуры деформирования концентрация точечных дефектов уменьшается. При определенной степени деформации концентрация точечных дефектов при 77 К оказывается выше концентрации точечных дефектов при 673 К, и в случае межузельных атомов они различаются на порядки величины. Высокая концентрация точечных дефектов в деформируемом материале при низких и умеренных температурах (77–423 К) является естественной, поскольку аннигиляция вакансий и межузельных атомов на дислокациях и их взаимная аннигиляция происходят менее интенсивно при низких температурах.

2) Сплавы с высокой энергией упорядочения. На рис. 3 представлена зависимость параметра дальнего порядка от деформации для различных температур испытания в сплаве Ni_3Ge . Так же как и в случае сплавов с низкой энергией АФГ, в области температур 77–423 К наблюдается слабая зависимость параметра дальнего порядка от температуры и степени деформации. Восстановление дальнего атомного порядка при повышенных температурах происходит практически с начала пластической деформации, в результате чего параметр дальнего порядка медленно изменяется с деформацией. Восстановление дальнего порядка в сплавах как с высокой, так и с низкой энергией АФГ происходит практически с одинаковой скоростью. В области повышенных температур в сплавах с высокой энергией АФГ параметр дальнего порядка слабо зависит от температуры испытания. Существенная зависимость параметра дальнего порядка от температуры возможна при степенях деформации, превышающих сотни процентов.

Зависимость плотности дислокаций от деформации и кривые упорядочения приведены на рис. 4, *a, b*. Здесь

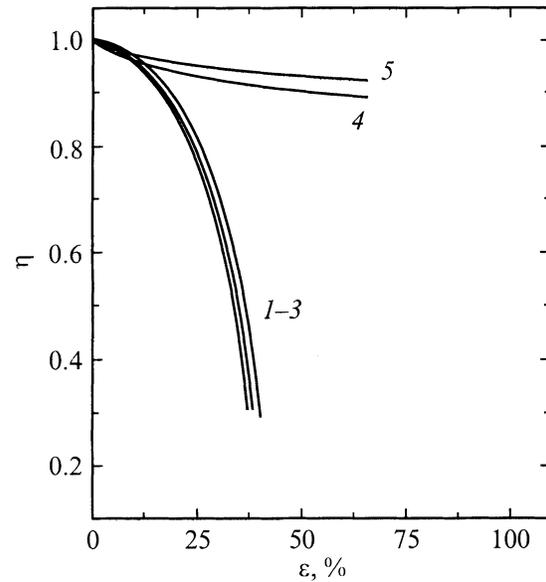


Рис. 3. Зависимость эффективного параметра дальнего порядка от деформации для различных температур испытания в сплаве Ni_3Ge . T, K : 1 — 77, 2 — 293, 3 — 423, 4 — 573, 5 — 673.

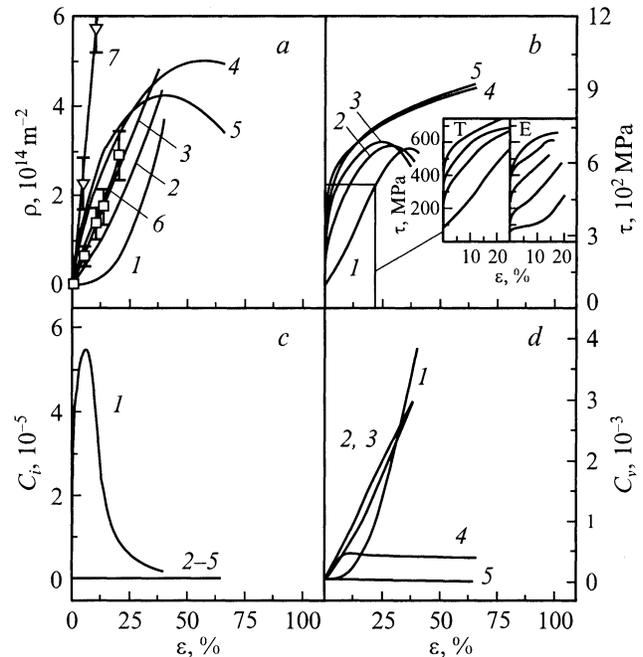


Рис. 4. Зависимость плотности дислокаций (*a*), деформирующего напряжения (*b*), концентрации точечных дефектов — межузельных атомов (*c*) и вакансий (*d*) — от деформации для различных температур испытания в сплаве Ni_3Ge . T, K : 1 — 77, 2 — 293, 3 — 423, 4 — 573, 5 — 673. Кривые 6 и 7 (часть *a*) соответствуют экспериментальным данным, полученным трансмиссионной микроскопией фольг Ni_3Ge [20,24] для 293 и 673 К соответственно. На вставке приведено сопоставление экспериментальных (*E*) зависимостей деформирующего напряжения τ от степени деформации ε для сплава Ni_3Ge [20,24] с рассчитанными из модели (*T*).

же представлены экспериментальные измерения плотности дислокаций для температур 293 (кривая 6) и 673 К (кривая 7). Из рис. 4, *a* видно, что плотность дислокаций существенно зависит от температуры. При 77–423 К происходит увеличение плотности дислокаций с температурой и деформацией. В области повышенных температур плотность дислокаций при определенных степенях деформации (различных для разных температур) уменьшается, что обусловлено более интенсивной аннигиляцией дислокаций в результате их переползания.

Зависимости концентраций точечных дефектов от степени деформации для различных температур приведены на рис. 4, *c, d*. Как и в случае сплава Ni₃Fe, наблюдается увеличение концентрации точечных дефектов с уменьшением температуры. Накопление точечных дефектов, их взаимная аннигиляция и аннигиляция на дислокациях происходят более интенсивно в сплавах с высокой энергией АФГ, что следует из сравнения рис. 2, *d* и 4, *d*.

Сопоставление теоретических и экспериментальных [24] кривых упрочнения для Ni₃Ge приведено на вставке к рис. 4, *b* и показывает удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных кривых.

Таким образом, в рамках сделанных предположений удастся удовлетворительно описать экспериментально наблюдаемые закономерности разрушения дальнего атомного порядка и деформационного упрочнения в сплавах со сверхструктурой L1₂, обладающих различными энергиями упорядочения. Проведенное моделирование процесса разрушения дальнего атомного порядка показывает, что в сплавах со сверхструктурой L1₂ значительное нарушение дальнего атомного порядка в области низких и умеренных температур наблюдается при деформациях порядка 30%. При сделанных предположениях в этой области температур энергия АФГ практически не влияет на интенсивность изменения параметра дальнего порядка. Ее влияние становится существенным в области повышенных температур деформирования, где наблюдается как качественное, так и количественное различие кривых $\eta(\epsilon)$ в зависимости от энергии АФГ. Описываемое явление разрушения дальнего порядка, по-видимому, не может быть связано с проявлением одного из механизмов разрушения дальнего порядка (так же как и процесс деформационного упрочнения), а является результатом совместного действия ряда механизмов, связанных с размножением как АФГ, так и точечных дефектов и дислокаций.

Список литературы

- [1] Л.Е. Попов, Н.А. Конева, И.В. Терешко. Деформационное упрочнение упорядоченных сплавов. *Металлургия*, М. (1979). 256 с.
- [2] А.Е. Ермаков, Т.А. Сорокина, В.А. Цурин, Ю.Г. Лебедев, Б.Н. Филиппов, Н.Г. Илющенко, Я.Б. Чернов. *ФММ* **48**, 6, 1180 (1979).
- [3] M.M. Dadrás, D.G. Morris. *Scripta Met. Mat.* **28**, 1245 (1993).
- [4] D.G. Morris, M.M. Dadrás, M.A. Morris. *Acta Met. Mater.* **41**, 1, 97 (1993).
- [5] A.R. Yavari, P.J. Desre. *Mater. Sci. Forum.* **88–90**, 43 (1992).
- [6] С.В. Старенченко, Н.Р. Сизоненко, В.А. Старенченко, Э.В. Козлов. *ФММ* **81**, 1, 84 (1996).
- [7] С.В. Старенченко, И.П. Замятина, В.А. Старенченко, Э.В. Козлов. *ФММ*. **85**, 2, 122 (1998).
- [8] С.В. Старенченко, Н.Р. Сизоненко, И.П. Замятина, В.А. Старенченко, Э.В. Козлов. *Порошковая металлургия* 3/4, 33 (1997).
- [9] С.В. Старенченко, И.П. Замятина, В.А. Старенченко, Э.В. Козлов. *ФММ* **90**, 1, 79 (2000).
- [10] С.В. Старенченко, И.П. Замятина, В.А. Старенченко, Э.В. Козлов. *Изв. вузов. Физика* 8, 3 (2000).
- [11] С.В. Старенченко, В.А. Старенченко. *Науч. тр. I Международного семинара им. В.А. Лихачева „Актуальные проблемы прочности“ и XXXIII семинара „Актуальные проблемы прочности“ (15–18 октября 1997)*. Новгород (1997). Т. 2. Ч. 2. С. 313.
- [12] В.А. Старенченко, О.Д. Пантюхова, С.В. Старенченко, С.Н. Колупаева. *Изв. вузов. Физика* **12**, 29 (2000).
- [13] В.А. Старенченко, О.Д. Пантюхова, С.В. Старенченко, С.Н. Колупаева. *ФММ* **91**, 1, 90 (2001).
- [14] В.А. Старенченко, О.Д. Пантюхова, С.В. Старенченко, С.Н. Колупаева. *Изв. вузов. Чер. металлургия* **12**, 54 (2000).
- [15] В.А. Старенченко, О.Д. Пантюхова, С.В. Старенченко, С.Н. Колупаева. *Вестн. ТГУ (Тамбов)* **5**, 2–3, 270 (2000).
- [16] Л.Е. Попов, Л.Н. Буйнова, В.А. Старенченко, В.С. Кобытев. *Металлофизика* **7**, 5, 56 (1985).
- [17] В.А. Старенченко, Ю.А. Абзаев. *ФММ* **9**, 1, 147 (1995).
- [18] С.Н. Колупаева, В.А. Старенченко, Л.Е. Попов. *Неустойчивость пластической деформации*. Изд-во Том. ун-та, Томск (1994). 300 с.
- [19] K.P. Gurov, A.V. Tsepelev. *Nucl. Matter.* **182**, 240 (1991).
- [20] В.А. Старенченко, Ю.В. Соловьева, Ю.А. Абзаев. *ФТТ* **41**, 454 (1999).
- [21] В.А. Старенченко, С.В. Старенченко, С.Н. Колупаева, О.Д. Пантюхова. *Изв. вузов. Физика* **1**, 66 (2000).
- [22] Н.А. Конева, Э.В. Козлов, Л.Е. Попов, Г.А. Перов, Л.А. Теплякова, Ю.П. Шаркеев. *Изв. вузов. Физика* **2**, 136 (1973).
- [23] Л.Я. Пудан, И.А. Терентьева, В.А. Старенченко, Л.Е. Попов. *Изв. вузов. Физика* **5**, 113 (1989).
- [24] В.А. Старенченко, Ю.В. Соловьева, Ю.А. Абзаев, Б.И. Смирнов. *ФТТ* **38**, 3050 (1996).
- [25] В.А. Старенченко, Ю.А. Абзаев, Л.Г. Черных. *Металлофизика* **9**, 2, 22 (1987).
- [26] С.В. Старенченко, И.П. Замятина, В.А. Старенченко. *Науч. тр. IV Международного семинара им. В.А. Лихачева „Современные проблемы прочности“ (18–22 сентября 2000)*. Старая Русса, Великий Новгород (2000). Т. 2. С. 97.
- [27] С.В. Старенченко, И.П. Замятина, В.А. Старенченко. *Тр. XXXVI семинара „Актуальные проблемы прочности“ (26–29 сентября 2000)*. Витебск (2000). С. 103.
- [28] Н.А. Конева, Л.А. Теплякова, В.А. Старенченко, Э.В. Козлов, В.С. Кобытев. *ФММ* **49**, 620 (1980).