

## Структура ядра сверхдислокаций в пирамидальных плоскостях скольжения и температурные аномалии деформационного поведения интерметаллида $Ti_3Al$

© Л.И. Яковенкова, Л.Е. Карькина, М.Я. Рабовская

Институт физики металлов УрО РАН,  
620219 Екатеринбург, Россия  
e-mail: yakovenkova@imp.uran.ru

(Поступило в Редакцию 17 декабря 2002 г. В окончательной редакции 20 февраля 2003 г.)

Для интерметаллида  $Ti_3Al$  со сверхструктурой  $D0_{19}$  проведен анализ результатов компьютерного моделирования структуры ядра сверхдислокаций в плоскостях базиса, призмы и пирамиды I и II типов. На основе модели термоактивированного превращения скользящих краевых  $2c + a$ -сверхдислокаций в дислокационные барьеры в плоскостях пирамиды предложено объяснение аномальной температурной зависимости предела текучести монокристаллического  $Ti_3Al$  при ориентации оси сжатия вблизи направления  $[0001]$ .

### Введение

В работе [1] изучена структура ядра  $2c + a$ -сверхдислокаций в плоскостях пирамиды I типа ( $\bar{2}021$ ) и II типа ( $11\bar{2}1$ ) в скользящих конфигурациях и в конфигурациях, которые могут быть охарактеризованы как дислокационные барьеры. В [2–5] получена структура ядра  $a$ -сверхдислокаций в плоскостях базиса и призмы. Компьютерное моделирование структуры ядра различного типа дислокаций было проведено методом молекулярной динамики с использованием  $N$ -частичных потенциалов межатомного взаимодействия для  $Ti_3Al$ . Необходимость проведения компьютерных расчетов связана с тем, что к настоящему моменту накоплен большой объем экспериментальных данных о существовании сильной ориентационной зависимости предела текучести  $\sigma_y$  монокристаллического  $Ti_3Al$ , сложной геометрии скольжения, а также различной температурной зависимости деформационных характеристик: нормальный ход  $\sigma_y(T)$  для плоскости базиса и призмы и аномальная зависимость с максимумом на кривой  $\sigma_y(T)$  для пирамидального скольжения. Однако имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные не могут дать детальной информации о тонкой структуре ядра  $a$ - и  $2c + a$ -сверхдислокаций в плоскостях базиса, призмы и пирамиды и не позволяют прояснить механизм дислокационных превращений, ответственных за особенности деформационного поведения  $Ti_3Al$ .

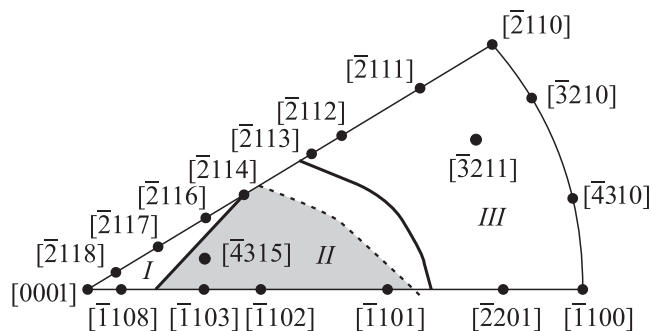
Наличие скользящих и заблокированных конфигураций дислокаций краевой и винтовой ориентаций в плоскостях пирамиды I и II типов в  $Ti_3Al$  подтверждается электронно-микроскопическими исследованиями [6–9]. Показано, что заблокированные конфигурации  $2c + a$ -сверхдислокаций в этих плоскостях наблюдаются при температурах деформации, соответствующих аномальному возрастанию предела текучести  $\sigma_y(T)$ . Подобно другим сверхструктурам (например,  $L1_2$ ,  $L1_0$  [10–12]), на наш взгляд, аномальная темпе-

ратурная зависимость деформационных характеристик интерметаллида  $Ti_3Al$ , обусловлена термически активированным превращением скользящих сверхдислокаций, осуществляющих пластическую деформацию, в дислокационные барьеры. Как следует из теории пластической деформации упорядоченных сплавов, учитывающей несколько типов превращений, происходящих в дислокационном ансамбле [13], необходимыми условиями наблюдения пика на кривой зависимости  $\sigma_y(T)$  являются следующие: во-первых, заблокированная конфигурация должна иметь более низкое значение энергии, чем скользящая конфигурация; во-вторых, энергия активации превращения скользящей конфигурации в заблокированную должна быть ниже энергии активации разрушения дислокационного барьера.

Целью настоящей работы является анализ результатов компьютерного моделирования структуры ядра сверхдислокации в плоскостях базиса, призмы и пирамиды I и II типов в скользящих конфигурациях и конфигурациях, соответствующих дислокационным барьерам. С учетом соотношения между энергиями этих дислокационных конфигураций и соотношениями между энергиями активации образования дислокационных барьеров рассмотрена связь структуры ядра сверхдислокаций с температурными аномалиями деформационных характеристик  $Ti_3Al$ . Обсуждаются экспериментально наблюдаемые особенности пластической деформации монокристаллического  $Ti_3Al$ , ориентированного для базисного, призматического и пирамидального скольжения.

### Анализ дислокационного ансамбля и деформационное поведение $Ti_3Al$

Обнаруженная экспериментально при деформации монокристаллов  $Ti_3Al$  сильная ориентационная зависимость предела текучести  $\sigma_y$  обусловлена многообразием векторов Бюргера и плоскостей скольжения сверхдислокаций. Анализ геометрии скольжения показал, что



**Рис. 1.** Стереографический треугольник  $[0001]-[1100]-[2110]$  для ГПУ решетки. Отмечены области преимущественного пирамидального (I), базисного (II) и призматического (III) скольжения.

в зависимости от условий эксперимента реализуется скольжение  $a$ ,  $2c + a$ -сверхдислокаций в плоскостях базиса, призмы и пирамиды. В результате компьютерного моделирования структуры ядра сверхдислокаций в этих плоскостях было установлено, что для каждой из систем скольжения дислокаций, характеризуемых вектором Бюргерса и плоскостью, существуют как скользящие конфигурации, так и дислокационные барьеры. Сложный дислокационный ансамбль может быть разделен на группы прежде всего в зависимости от ориентации оси деформации монокристаллов  $Ti_3Al$ . На рис. 1 представлен стандартный стереографический треугольник ( $[0001]-[1100]-[2110]$ ), на котором обозначены области, соответствующие призматическому, базисному и пирамидальному скольжению. Область I на рис. 1 (ограниченная сплошной линией) в пределах  $20-25^\circ$  от направления  $[0001]$  соответствует ориентациям монокристаллов для преимущественного скольжения по плоскостям пирамиды I и II типов. Для монокристаллов с ориентировками оси деформирования в пределах этой области факторы Шмида<sup>1</sup> в пирамидальных плоскостях  $f_{\{2021\}\{1126\}}$  и  $f_{\{1121\}\{1126\}}$  близки к 0,5, тогда как факторы Шмида для призматических и базисных плоскостей скольжения близки к нулю. Область II на рис. 1, также ограниченная сплошными линиями, соответствует ориентациям оси деформирования для преимущественного базисного скольжения (фактор Шмида  $f_{\{0001\}\{1120\}}$  максимален), область III для преимущественного призматического скольжения (фактор Шмида  $f_{\{1100\}\{1120\}}$  максимален).

Рассмотрение особенностей деформационного поведения  $Ti_3Al$  начнем с анализа дислокационного ансамбля в плоскостях призмы и базиса, для которых получено низкое значение предела текучести и нормальная, падающая с ростом температуры зависимость деформирующего напряжения [14,15]. Далее рассмотрим дислокационный ансамбль в плоскостях пирамиды I

и II типов, для которых экспериментально получены пик на кривой зависимости  $\sigma_y(T)$ , существенно более высокое значение предела текучести и низкое значение деформации до разрушения [6,16-17].

1) Призматическое и базисное скольжение. Анализ экспериментальных данных [15] показывает, что критическое результирующее сдвиговое напряжение<sup>2</sup> при комнатной температуре составляет в плоскости призмы  $\sigma_y^{\{1100\}} = 50 \div 150$  МПа, в плоскости базиса  $\sigma_y^{\{0001\}} = 180 \div 260$  МПа, т.е. напряжение течения в плоскости базиса приблизительно в 2 раза выше, чем в плоскости призмы. Этот факт легко объясним, если сопоставить экспериментальные данные с результатами наших расчетов структуры ядра  $a$ -сверхдислокаций в плоскостях базиса и призмы, схематически показанных на рис. 2, *a, b*. В [18-20] были изучены форма  $\gamma$ -поверхности и структура ядра сверхдислокаций с вектором Бюргерса  $1/3 [2\bar{1}10]$  в трех возможных сечениях (I, I' и II) плоскости призмы (детали обсуждения см. в [1]). Оказалось, что в плоскости призмы I' типа значения энергий антифазной границы, дефектов упаковки и соответственно энергии расщепленной  $a$ -сверхдислокации, полученные в результате релаксации ниже, чем в плоскостях призмы I и II типов. Ядро сверхчастичной дислокации краевой и винтовой ориентации в плоскости призмы I' типа является планарным, т.е. область максимальных смещений локализована вблизи плоскости I' типа, содержащей антифазную границу (рис. 2, *a*). Это и является причиной низкого значения напряжения Пайерлса для начала движения сверхдислокации, обеспечивая ее высокую подвижность в плоскости призмы I' типа и наблюдаемое экспериментально низкое значение предела текучести в этой плоскости в  $Ti_3Al$ . При ориентации оси деформирования монокристаллического  $Ti_3Al$  в области III стандартного стереографического треугольника (рис. 1) фактор Шмида максимален в плоскости призмы, поэтому предел текучести должен иметь наиболее низкое значение.

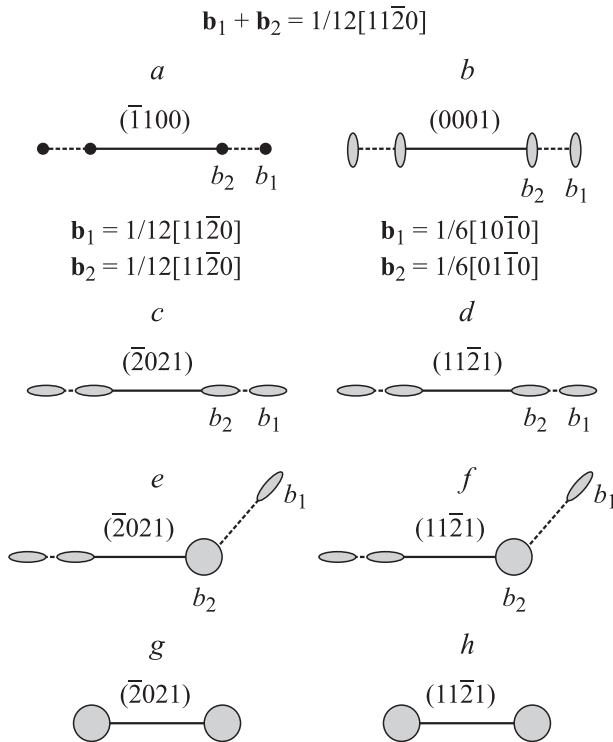
Компьютерное моделирование  $a$ -сверхдислокаций в плоскости базиса, расщепленной с образованием полосы антифазной границы, показало, что структура ядра сверхдислокаций  $30^\circ$  и краевой ориентации остается планарной, тогда как для сверхдислокации  $60^\circ$  и винтовой ориентации для частичных дислокаций Шокли, образующих сверхчастичную  $1/6[2\bar{1}10]$  дислокацию, появляются заметные относительные смещения в призматической плоскости поперечного скольжения (рис. 2, *b*). В целом же область, характеризующая ядро  $a$ -сверхдислокаций, локализована вблизи плоскости базиса, напряжение Пайерлса для начала движения сверхдислокации достаточно низкое, поэтому значение предела текучести в плоскости базиса не слишком высоко, но выше, чем в плоскости призмы.

<sup>1</sup> Фактор Шмида  $f = (\mathbf{bt})(\mathbf{bn})$ , где  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{t}$  — единичные векторы вдоль вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$ , нормали к плоскости скольжения  $\mathbf{n}$  и оси деформации  $\mathbf{t}$ .

<sup>2</sup> Критическое результирующее сдвиговое напряжение — компонента сдвигового напряжения  $\sigma_{\mathbf{bn}}$ , действующего на дислокацию с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  и нормалью  $\mathbf{n}$  к плоскости скольжения.

Отметим, что непланарный характер ядра частичных дислокаций Шокли проявляется в скачкообразном движении сверхдислокации в плоскости базиса, которое наблюдалось в экспериментах *in situ* [21].

Когда направление оси деформирования принадлежит области II стереографического треугольника, фактор Шмида максимален в плоскости базиса. Если  $f_{\{\bar{1}100\}\langle\bar{2}110\rangle} < 0.5f_{\{0001\}\langle\bar{2}110\rangle}$  (незаштрихованная часть области II), тогда приведенное сдвиговое напряжение выше напряжения течения в плоскости базиса, но ниже, чем в плоскости призмы. Таким образом, в этой области ориентации оси сжатия деформация будет осуществляться движением дислокации только в плоскости базиса. В заштрихованной части области II стереографического треугольника  $0.5f_{\{0001\}\langle\bar{1}\bar{1}20\rangle} < f_{\{\bar{1}100\}\langle\bar{1}\bar{1}20\rangle} < f_{\{0001\}\langle\bar{1}\bar{1}20\rangle}$ , поэтому одновременно будет происходить как базисное, так и призматическое скольжение. Это не должно приводить к существенному увеличению предела текучести по сравнению с другими ориентациями в области II стереографического треугольника. Однако взаимодействие двух систем скольжения может привести к образованию неразрушаемых дислокационных барьеров и понижению



**Рис. 2.** Схема расщепления *a*-сверхдислокации в плоскости призмы I' типа  $(\bar{1}100)$  (a) и базиса  $(0001)$  (b);  $2c + a$ -сверхдислокации в плоскостях пирамиды I типа  $(\bar{2}021)$  (c, e, g) и II типа  $(11\bar{2}1)$  (d, f, h). a-d — скользящие конфигурации; e-f — дислокационные барьеры, характеризуемые расщеплением краевой сверхчастичной дислокации одновременно в плоскостях пирамиды и базиса; g, h — непланарная структура ядра винтовой сверхчастичной дислокации в пирамидальных плоскостях. — — APB, --- — SF.

**Таблица 1.** Максимальные факторы Шмида в базисной и призматической системе скольжения для ориентации  $[\bar{4}315]$ .

№	Система скольжения	Фактор Шмида
1	$[\bar{2}110](0001)$	0.44
2	$[1\bar{2}10](\bar{1}010)$	0.35
3	$[1\bar{2}10](0001)$	0.33
4	$[\bar{2}110](0\bar{1}10)$	0.19

пластичности монокристаллов  $Ti_3Al$  рассматриваемых ориентировок.

Например, для ориентировки  $[\bar{4}315]$  (табл. 1, рис. 1) факторы Шмида в первичных призматической и базисной плоскостях связаны соотношением  $f_{\{\bar{1}010\}\langle\bar{1}210\rangle} > 0.5f_{\{0001\}\langle\bar{2}110\rangle}$ , поэтому можно ожидать, что деформация будет осуществляться одновременно в этих системах скольжения. Отметим, что вторичные системы скольжения в плоскостях базиса и призмы (табл. 1) имеют существенно более низкие факторы Шмида и участия в деформации не принимают. Между притягивающимися дислокациями первичных призматической и базисной систем скольжения возможны дислокационные реакции с образованием барьеров на линии пересечения этих плоскостей.

В соответствии с результатами компьютерного моделирования [18–20] *a*-сверхдислокации в плоскостях призмы и базиса расщеплены на сверхчастичные дислокации, ограничивающие полосу антифазной границы в соответствии с реакциями

$$1/3[\bar{1}2\bar{1}0]_{(\bar{1}010)} = 1/6[\bar{1}2\bar{1}0]_{(\bar{1}010)} + APB_{(\bar{1}010)} + 1/6[\bar{1}2\bar{1}0]_{(\bar{1}010)}, \quad (1)$$

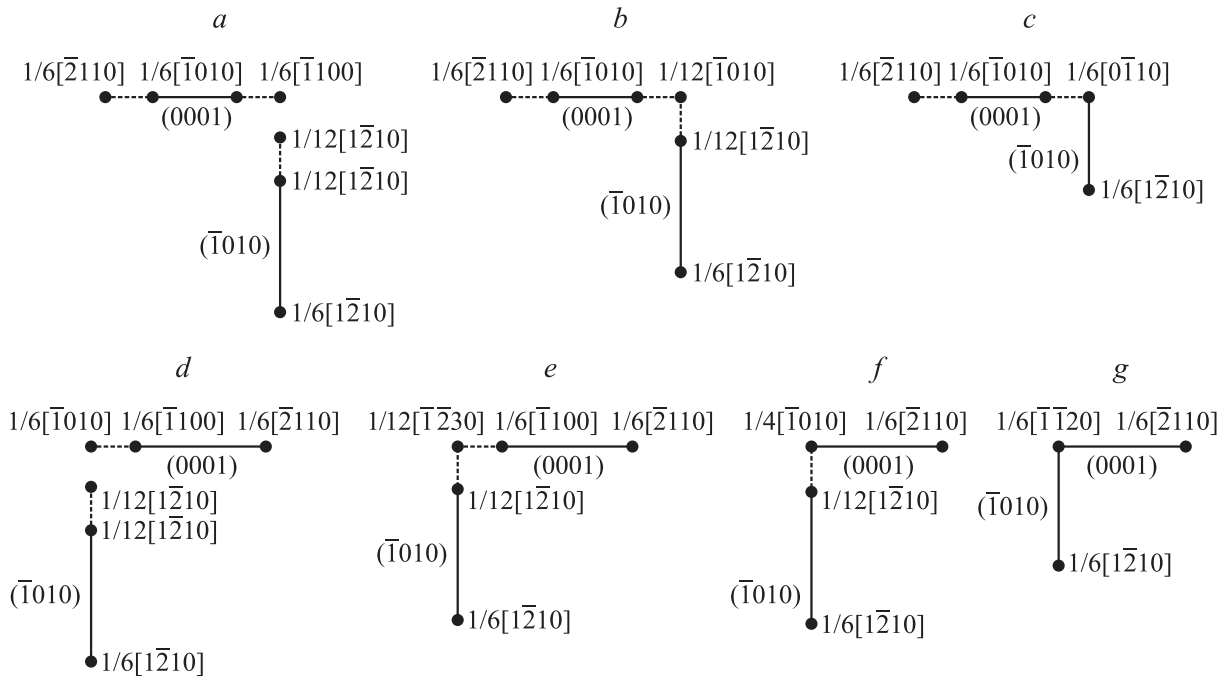
$$1/3[\bar{2}110]_{(0001)} = 1/6[\bar{2}110]_{(0001)} + APB_{(0001)} + 1/6[\bar{2}110]_{(0001)}. \quad (2)$$

Каждая из сверхчастичных дислокаций, как в плоскости базиса, так и в плоскости призмы, расщеплена на две частичные дислокации. В базисной плоскости частичная дислокация ограничивает комплексный дефект упаковки. Вектор сдвига, равный вектору Бюргера частичной дислокации, соответствует локальному минимуму на  $\gamma$ -поверхности в плоскости базиса. Векторы Бюргера частичных дислокаций в плоскости призмы I' типа определены в результате компьютерного моделирования и соответствуют метастабильному дефекту упаковки. Реакции расщепления сверхчастичных дислокаций имеют вид в плоскости базиса

$$1/6[\bar{2}110]_{(0001)} = 1/6[\bar{1}100]_{(0001)} + CSF_{(0001)} + 1/6[\bar{1}010]_{(0001)}, \quad (3)$$

в плоскости призмы

$$1/6[1\bar{2}10]_{(\bar{1}010)} = 1/12[1\bar{2}10]_{(\bar{1}010)} + SF_{(\bar{1}010)} + 1/12[1\bar{2}10]_{(\bar{1}010)}. \quad (4)$$



**Рис. 3.** Последовательные стадии образования дислокационных барьеров при взаимодействии сверхдислокаций в плоскостях базиса и призмы. — — APB, --- — SF.

Последовательные стадии образования дислокационных барьеров на взаимодействующих сверхдислокациях в плоскости базиса (0001) и призмы ( $\bar{1}010$ ) представлены на рис. 3. Оси дислокаций, образующих дислокационные барьеры направлены вдоль линии пересечения этих плоскостей  $[1\bar{2}10]$ . Таким образом, в реакцию вступают винтовая **a**-сверхдислокация в плоскости призмы и  $60^\circ$  **a**-сверхдислокация в плоскости базиса. Анализ показывает, что для всех ориентировок, относящихся к заштрихованной части области II на рис. 1, дислокационные барьеры, образующиеся при взаимодействии **a**-сверхдислокаций первичных призматической и базисной плоскостей, эквивалентны представленным на рис. 3, *c, g*. Образующиеся два типа барьеров зависят от последовательности дислокационных реакций между частичными дислокациями, образующими **a**-сверхдислокацию в плоскости базиса и призмы. В соответствии с (3), (4) частичные дислокации  $1/12[1\bar{2}10]$ , принадлежащие плоскости призмы, могут вступать в дислокационную реакцию либо с дислокацией  $1/6[\bar{1}100]$ , либо с дислокацией  $1/6[\bar{1}010]$ , которые принадлежат плоскости базиса. В первом случае последовательные стадии образования дислокационного барьера показаны на рис. 3, *a–c*, во втором случае — на рис. 3, *d–g*. Частичные дислокации с вектором Бюргера  $1/6[\bar{1}100]$  и  $1/12[1\bar{2}10]$  притягиваются, образуя вершинную дислокацию с вектором Бюргера  $1/12[\bar{1}010]$  (рис. 3, *b*). Образующаяся вершинная дислокация отталкивается от второй частичной дислокации  $1/6[\bar{1}010]$  в плоскости базиса, но может вступать в реакцию с частичной дислокацией  $1/12[1\bar{2}10]$  в плоскости призмы с образованием конфигурации, показанной

на рис. 3, *c*. Рекомбинация  $1/12[\bar{1}010]$  и  $1/12[1\bar{2}10]$  дислокаций способствует поле напряжений сверхчастичной  $1/6[1\bar{2}10]$  дислокации в плоскости призмы.

Аналогично поле напряжений  $1/6[1\bar{2}10]$  дислокации способствует образованию вершинной дислокации  $1/12[1\bar{2}30]$  (рис. 3, *d, e*) на первом шаге формирования второго дислокационного барьера. Образовавшаяся вершинная дислокация отталкивается от частичной дислокации  $1/12[1\bar{2}10]$  в плоскости призмы, но притягивается к частичной дислокации  $1/6[\bar{1}100]$  в плоскости базиса. В результате их рекомбинации образуется вершинная дислокация  $1/4[\bar{1}010]$  (рис. 3, *f*). На последнем шаге происходит рекомбинация дислокаций  $1/4[\bar{1}010]$  и с  $1/12[1\bar{2}10]$  в поле напряжений сверхчастичных дислокаций  $1/6[\bar{2}110]$  и  $1/6[1\bar{2}10]$  базисной и призматической плоскостей и образуется дислокационный барьер (рис. 3, *g*)

Полученные конфигурации (рис. 3, *c, g*) являются неразрушаемыми дислокационными барьерами. Появление таких барьеров может существенно понижать пластичность монокристаллов с ориентациями оси деформации, принадлежащими заштрихованной части области II стереографического треугольника (рис. 1), поскольку они служат зародышами микротрещин.

2) Пирамидальное скольжение. Анализ экспериментальных данных показывает, что аномалия предела текучести монокристаллического  $Ti_3Al$  связана с движением  $2c + a$ -сверхдислокаций в плоскостях пирамиды I и II типов. В [16,17] после деформации при  $600$  и  $700^\circ C$  в области аномального возрастания предела текучести с температурой наблюдали полосы скольже-

ния заблокированных  $2c + a$ -сверхдислокаций краевой и близкой к краевой ориентации. В [7–9] протяженные прямолинейные винтовые  $2c + a$  сверхдислокации были обнаружены после деформации при комнатной температуре, тогда как после деформации при  $400^\circ\text{C}$  наблюдали также протяженные прямолинейные краевые сверхдислокации.

Таким образом, из эксперимента следует, что в той области, где предел текучести слабо зависит от температуры (до начала аномального возрастания  $\sigma_y(T)$ ), наблюдаются винтовые заблокированные  $2c + a$ -сверхдислокации. В области аномального возрастания  $\sigma_y(T)$  наблюдаются краевые и близкие к краевым ориентациям заблокированные  $2c + a$ -сверхдислокации в плоскостях пирамиды I и II типов. Хорошо известно, что аномальное возрастание  $\sigma_y(T)$  в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  [12,13] обусловлено термически активированным превращением скользящих конфигураций сверхдислокаций в дислокационные барьеры Кира–Вильсдрофа. Мы считаем, что аномальная зависимость  $\sigma_y(T)$  в  $\text{Ti}_3\text{Al}$  также связана с механизмом термоактивированного превращения сверхдислокаций.

Для объяснения аномальной температурной зависимости предела текучести в  $\text{Ti}_3\text{Al}$  рассмотрим результаты компьютерного моделирования структуры ядра  $2c + a$ -сверхдислокаций в плоскости пирамиды I и II типов. На рис. 2, *c, d* схематически представлена структура ядра скользящих сверхдислокаций в плоскостях пирамиды I и II типов. В соответствии с результатами [1] ядро краевых сверхдислокаций является планарным, т.е. область максимальных смещений локализована вблизи плоскостей пирамиды I и II типов, содержащих антифазную границу. На рис. 2, *e, f* схематически представлена структура дислокационных барьеров на сверхдислокациях краевой ориентации, характеризуемая расщеплением одной из сверхчастичных дислокаций в плоскости базиса, тогда как другая сверхчастичная дислокация и полоса антифазной границы расположены в плоскости пирамиды. Механизм термоактивированного превращения сверхдислокаций предполагает наличие скользящих и заблокированных дислокационных конфигураций, а также более низкое значение энергии дислокационного барьера по сравнению с энергией скользящей дислокации. Наши расчеты показывают, что для краевой  $2c + a$ -сверхдислокации это соотношение выполняется для плоскостей пирамиды I и II типов.

В табл. 2 приведен выигрыш энергии<sup>3</sup> на единицу длины дислокации при расщеплении  $2c + a$ -сверхдислокации краевой ориентации в скользящей конфигурации и в конфигурации дислокационного барьера для плоскостей пирамиды I и II типов. В табл. 2 внесены значения энергий тех барьеров, которые имеют наименьшее значение. Оказалось, что для плоскостей пирамиды I и II типов такие дислокационные барьеры

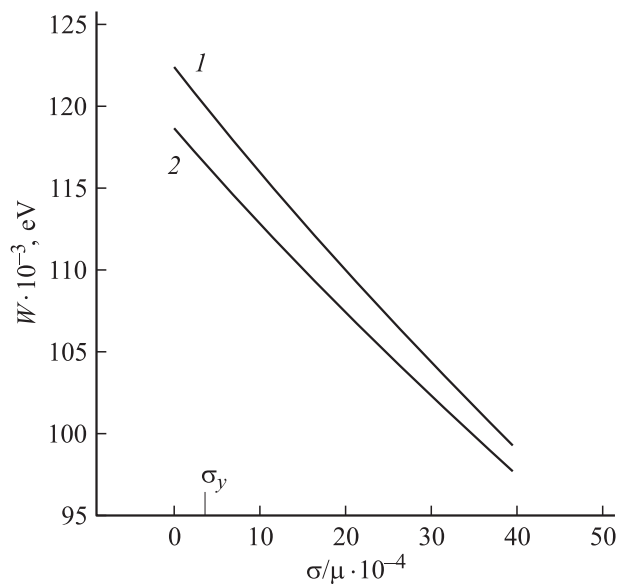
<sup>3</sup> Выигрыш энергии определяется как разность энергии сверхчастичной дислокации в конфигурации после релаксации и в нерасщепленной конфигурации.

**Таблица 2.** Выигрыш энергии при расщеплении  $c + a/2$  сверхдислокации в скользящей конфигурации и в конфигурации дислокационного барьера

Система скольжения, ось дислокации	Скользящая конфигурация, $\text{eV} \cdot \text{nm}^{-1}$	Дислокационный барьер, $\text{eV} \cdot \text{nm}^{-1}$
$[\bar{1}\bar{1}26](11\bar{2}1), [\bar{1}010]$	27.14	30.15
$[2\bar{1}\bar{1}6](\bar{2}021), [1\bar{2}10]$	46.48	46.86

соответствуют перерасщеплению сверхчастичной дислокации в плоскость базиса с образованием полосы комплексного дефекта упаковки (рис. 2, *e, f*).

В рамках приближений [22,23] в работе [24] была вычислена энергия активации образования дислокационных барьеров в плоскостях пирамиды I и II типов. Образование барьеров включало в себя рекомбинацию  $c + a/2$ -сверхчастичной дислокации в плоскости пирамиды и прогиб частичной дислокации  $1/6\langle\bar{1}100\rangle$  в плоскость базиса. На рис. 4 представлена зависимость энергии активации образования рассматриваемых барьеров от внешнего сдвигового напряжения. Видно, что энергии активации в плоскостях пирамиды I и II типов близки. Это свидетельствует о том, что если блокировка  $c + a/2$ -сверхчастичной дислокации возможна в одной из пирамидальных плоскостей, то она возможна и в другой. Можно сравнить рассчитанные значения энергии активации образования барьеров со значениями, которые могут быть получены из экспериментальной зависимости предела текучести от температуры в  $\text{Ti}_3\text{Al}$  [8,9,16,17]



**Рис. 4.** Зависимость энергии активации образования барьеров на краевых сверхдислокациях от величины приложенного напряжения ( $\mu$  — модуль сдвига). Дислокационные барьеры в плоскости пирамиды I типа ( $2021$ ) (1) и в плоскости пирамиды II типа ( $11\bar{2}1$ ) (2).

при обработке этих данных по эмпирической формуле  $\sigma \sim \exp(-W/kT)$  (где  $k$  — постоянная Больцмана). Анализ имеющихся экспериментальных данных по  $\sigma_y(T)$  ( $\sigma_y \sim 1.2 \text{ GPa}$  [3]) в области температур  $300\text{--}650^\circ\text{C}$  дает значения энергии активации образования барьеров  $W \sim 0.07\text{--}0.15 \text{ eV}$ . Представленные на рис. 4 кривые дают близкие к экспериментальным значения энергии активации образования барьеров на краевых дислокациях.

Анализ геометрии скольжения показал, что при ориентациях оси деформирования в пределах области  $I$  стереографического треугольника (рис. 1) деформация монокристаллического  $\text{Ti}_3\text{Al}$  осуществляется в плоскостях пирамиды как  $I$ , так и  $II$  типов. Важным результатом компьютерного моделирования является вывод о термоактивированном движении дислокаций в обеих системах скольжения. В противном случае должна была бы исчезнуть температурная аномалия  $\sigma_y(T)$ , что противоречит эксперименту. Аномалия исчезает только при ориентировках (области  $II$  и  $III$  стереографического треугольника на рис. 1), для которых происходит скольжение сверхдислокаций  $\mathbf{a}$ -типа в плоскостях призмы и базиса. Наличие двух типов термоактивированной блокировки сверхдислокации, принадлежащей различным системам скольжения, является следствием сложности дислокационного ансамбля в этих сплавах.

Электронно-микроскопическое изучение дислокационной структуры показало [7,8], что после деформации монокристаллического  $\text{Ti}_3\text{Al}$  при комнатной температуре наблюдаются протяженные  $2\mathbf{c} + \mathbf{a}$ -сверхдислокаций винтовой ориентации в плоскости пирамиды  $I$  и  $II$  типов, в то время как блокировка краевых сверхдислокаций наблюдается при более высокой температуре ( $T > 300^\circ\text{C}$ ) в области аномального возрастания  $\sigma_y(T)$ . Наблюдаемое значение предела текучести при рассматриваемых ориентировках в области температур от комнатной до  $T \sim 300^\circ\text{C}$  приблизительно в 5 раз выше значений предела текучести для призматического и базисного скольжения. Наши расчеты показывают, что ядро винтовой ( $\mathbf{c} + \mathbf{a}/2$ )-сверхчастичной дислокации в плоскостях пирамиды  $I$  и  $II$  типов имеет непланарную структуру как в исходной скользящей конфигурации, так и в конфигурации дислокационного барьера (рис. 2,  $g, h$ ) и характеризуется распределением смещений одновременно в плоскостях пирамиды  $I$  и  $II$  типов и призмы. Таким образом, по результатам компьютерного моделирования можно сказать, что сверхчастичная дислокация винтовой ориентации в плоскостях пирамиды испытывает спонтанную блокировку. Неplanарная структура ядра для винтовой дислокации была получена и для других типов структуры (ГЦК [25], ОЦК [26] и ГПУ [27], упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  [25] и  $D0_{19}$  [28]). Полученная особенность структуры ядра винтовой сверхдислокации может объяснить высокие значения предела текучести для рассматриваемой ориентации монокристалла  $\text{Ti}_3\text{Al}$  в пирамидальных плоскостях.

При ориентации оси деформирования монокристаллов в области  $I$  стереографического треугольника (рис. 1) обычно первичной пирамидальной системой скольжения является не одна система, а несколько. Например, для точной  $[0001]$  оси деформации равные максимальные факторы Шмида имеют 24 системы скольжения  $\langle 11\bar{2}6 \rangle \{ \bar{2}201 \}$ . При отклонении от точной  $[0001]$  ориентации число систем скольжения хотя и уменьшается, но еще достаточно высоко. Так, для ориентации  $[\bar{2}118]$ , также принадлежащей области  $I$  стереографического треугольника, две системы скольжения  $[1\bar{2}16](\bar{2}201)$  и  $[11\bar{2}6](\bar{2}201)$  имеют факторы Шмида  $f = 0.49$  и еще две вторичные системы скольжения  $[2\bar{1}\bar{1}6](\bar{2}201)$  и  $[2\bar{1}\bar{1}6](\bar{2}111)$  имеют факторы Шмида  $f = 0.46$ , очень близкие к факторам Шмида первичных систем скольжения. Таким образом, и для ориентировки  $[\bar{2}118]$  деформация может осуществляться в четырех системах скольжения. Множественность пирамидальных систем скольжения приводит (как и в случае взаимодействия базисной и призматической систем скольжения) к образованию неразрушаемых дислокационных барьеров при взаимодействии дислокаций двух пирамидальных систем скольжения. Образование таких барьеров является существенной составляющей, обуславливающей высокое значение предела текучести при пирамидальном скольжении. Эти барьеры могут быть также зародышами микротрещин. Кроме того, низкая подвижность сверхдислокаций как краевой, так и винтовой ориентации в пирамидальных плоскостях приводит к тому, что образующиеся трещины раскрываются хрупко, без заметной пластической зоны, что приводит к низкой пластичности, которая наблюдается экспериментально при рассматриваемых ориентировках [7–9,16].

## Выводы

По результатам компьютерного моделирования структуры ядра  $\mathbf{a}$ - и  $2\mathbf{c} + \mathbf{a}$ -сверхдислокаций в призматических, базисных и пирамидальных плоскостях  $\text{Ti}_3\text{Al}$  можно сделать следующие выводы.

1. Установлено, что планарный характер ядра  $\mathbf{a}/2$ -сверхчастичной дислокации как винтовой, так и краевой ориентации в плоскости призмы  $I$  типа обеспечивает низкое значение предела текучести в этой области. Более высокое значение предела текучести в плоскости базиса обусловлено неplanарной структурой ядра частичной дислокации Шокли, входящей в состав  $\mathbf{a}/2$ -сверхчастичной дислокации винтовой и  $60^\circ$  ориентации.

2. Показано, что энергия дислокационных барьеров на краевых  $\mathbf{c} + \mathbf{a}/2$ -дислокациях, расщепленных одновременно в плоскостях пирамиды и базиса, ниже энергии дислокации в соответствующих скользящих конфигурациях.

3. Для сверхчастичной  $c + a/2$ -дислокации винтовой ориентации в плоскостях пирамиды I и II типов получена непланарная структура ядра, характеризующаяся распределением смещений в призматической и нескольких пирамидальных плоскостях.

4. Предложена дислокационная теория деформационного поведения монокристаллического  $Ti_3Al$  при пирамидальном, базисном и призматическом скольжении на основе результатов компьютерного моделирования структуры ядра сверхдислокаций.

5. На основе модели термоактивированного преобразования скользящих краевых  $2c + a$ -сверхдислокаций в дислокационный барьер в плоскостях пирамиды дано объяснение аномальной температурной зависимости предела текучести монокристаллического  $Ti_3Al$  при ориентации оси сжатия вблизи направления  $[0001]$ .

Один из авторов (М.Я. Рабовская) выражает благодарность Комиссии РАН по работе с молодежью (грант № 69 Шестого конкурса-экспертизы 1999 г. научных проектов молодых ученых РАН).

- [18] Яковенкова Л.И., Кирсанов В.В., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я., Балашов А.Н. // ФММ. 2000. Т. 89. Вып. 3. С. 31–38.
- [19] Yakovenkova L.I., Kirsanov V.V., Karkina L.E., Rabovskaya M.Ya., Balashov A.N. // Society of Photo-optical Instrumentation Engineering (SPIE). 1999. Vol. 3987. P. 159–163.
- [20] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // Сб. конф. „Структура и свойства металлов и сплавов“. Изд-во УрО РАН, 1999. С. 237–242.
- [21] Legros M., Couret A., Caillard D. // Phil. Mag. A. 1996. Vol. 73. P. 81–99.
- [22] Greenberg B.A., Yakovenkova L.I. // Phys. St. Sol. (a). 1973. Vol. 18. P. K129–K133.
- [23] Гринберг Б.А., Яковенкова Л.И. // Физ. мет. металловед. 1973. Т. 36. С. 1166–1176.
- [24] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // Физ. мет. металловед. 1999. Т. 87. Вып. 3. С. 44–56.
- [25] Карькина Л.Е., Гринберг Б.А., Яковенкова Л.И. // Физ. мет. металловед. 1986. Т. 61. Вып. 4. С. 695–701.
- [26] Vitek V. // Crystal Lattice Defects. 1974. Vol. 5. P. 1–34.
- [27] Vitek V., Igarashi M. // Phil. Mag. A. 1991. Vol. 63. P. 1059–1075.
- [28] Cserti J., Khantha M., Vitek V., Pope D.P. // Mat. Sci. Eng. A. 1992. Vol. 152. P. 95–102.

## Список литературы

- [1] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 1. С. 60–66.
- [2] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // Физ. мет. металловед. 2002. Т. 93. Вып. 3. С. 1–9.
- [3] Карькина Л.Е., Яковенкова Л.И. // Изв. АН. Сер. физ. 2001. Т. 65. Вып. 6. С. 807–810.
- [4] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // Изв. АН. Сер. физ. 2002. Т. 66. Вып. 6. С. 891–894.
- [5] Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Рабовская М.Я. // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 10. С. 000.
- [6] Minonishi Y. // Phil. Mag. A. 1991. Vol. 63. P. 1085–1093.
- [7] Панова Е.В., Карькина Л.Е., Романов Е.П. // Физ. мет. металловед. 1993. Т. 75. Вып. 4. С. 166–175.
- [8] Панова Е.В., Романов Е.П., Карькина Л.Е. // Физ. мет. металловед. 1995. Т. 80. Вып. 3. С. 166–173.
- [9] Панова Е.В., Карькина Л.Е., Гринберг Б.А., Романов Е.П. // Физ. мет. металловед. 1998. Т. 85. Вып. 1. С. 111–116.
- [10] Copley S.M., Kear V.H. // Trans. MS AIME, 1967. Vol. 239. P. 977–984.
- [11] Kawabata T., Takezono Y., Kanai T., Izumi O. // Acta Metall. 1988. Vol. 36. P. 963–975.
- [12] Гринберг Б.А., Иванов М.А., Горностырев Ю.Н., Яковенкова Л.И. // Физ. мет. металловед. 1978. Т. 46. Вып. 4. С. 813–839.
- [13] Гринберг Б.А., Сюткина В.И. Новые методы упрочнения сплавов. М.: Металлургия, 1985.
- [14] Inui H., Toda Y., Shirai Y., Yamaguchi M. // Phil. Mag. A. 1994. Vol. 69. P. 1161–1177.
- [15] Legros M., Couret A., Caillard D. // Phil. Mag. A. 1996. Vol. 73. P. 61–80.
- [16] Minonishi Y., Yoo M.H. // Phil. Mag. Lett. 1990. Vol. 61. P. 203–208.
- [17] Minonishi Y. // Phil. Mag. A. 1991. Vol. 63. P. 1085–1093.