

07,08

Взаимодействие дислокаций с наноразмерными выделениями метастабильной фазы и дисперсионное упрочнение сплава Fe—Cu

© Ю.Н. Горностырев^{1,2}, И.Н. Карькин^{1,2}, Л.Е. Карькина¹¹ Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия² Институт квантового материаловедения,
Екатеринбург, Россия

E-mail: lidiya.karkina@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 29 ноября 2010 г.)

Методом молекулярной динамики исследовано взаимодействие дислокаций с обогащенными медью выделениями в матрице ОЦК-железа. Показано, что дислокации стимулируют развитие фазовой неустойчивости выделений ОЦК-меди в определенном интервале их размеров. Этот процесс сопровождается захватом дислокаций выделениями и дает значительный вклад в упрочнение. Полученные результаты позволяют объяснить наблюдаемую зависимость упрочнения в системе Fe—Cu от размера выделений.

1. Введение

Легирование является одним из важных методов управления структурным состоянием и свойствами сплавов. Дисперсные выделения могут не только обеспечивать эффективное упрочнение [1], но также служить местами зарождения новой фазы, способствовать измельчению структурных элементов [2,3]. Особый интерес вызывает использование ультрадисперсных частиц размером 10–100 nm (нановыделения) для повышения прочностных свойств [4] малоуглеродистых сталей. Недавно было предложено заменить традиционно используемую схему легирования сталей Nb и V добавкой Cu [5]. Формирующиеся в процессе охлаждения наноразмерные, обогащенные медью частицы в матрице α -Fe вызывают дисперсионное упрочнение стали, обеспечивая при этом высокую пластичность и вязкость разрушения. В то время как упрочняющий эффект преципитатов меди известен уже давно [6], механизм этого явления, а также факторы, контролирующие образование наноразмерных выделений меди, остаются предметом дискуссий [7,8].

Растворимость меди в матрице α -Fe невелика и варьируется от 0.4% при 973 K до 1.8% при 1126 K [9]. При более низких температурах медь практически нерастворима в железе; при более высоких имеет место $\alpha \rightarrow \gamma$ -фазовый переход в матрице Fe, и растворимость меди существенно увеличивается. В работе [10] отмечалось изменение растворимости меди при переходе через температуру Кюри α -Fe $T_C = 1042$ K.

Кинетика распада пересыщенных твердых растворов Fe—Cu (таких как Fe—Cu, Fe—Cu—Mn, Fe—Cu—Ni) исследовалась экспериментально во многих работах — как при отжге [11–13], так и при облучении [14–16]. Установлено, что формирование выделений Cu в матрице ОЦК-Fe происходит в несколько стадий [11,13,17]. Сначала образуются нановыделения с ОЦК-решеткой, содержащие до 50–70% меди [15,16,18]. Затем (с увеличением размера) наблюдается их перестройка в плот-

ноупакованную фазу с решеткой 9R (двойникованная по каждой 9-й плоскости ГЦК-решетка), и, наконец, при дальнейшем увеличении размера выделений в них реализуется ГЦК-структура.

Ярко выраженное влияние обогащенных медью ОЦК-выделений на механические свойства α -Fe стимулирует интерес исследователей к изучению структурного состояния, термодинамических и упругих свойств твердого раствора Fe—Cu [19]. В то же время вопрос о механизме, обеспечивающем значительное улучшение механических свойств за счет метастабильных наноразмерных выделений, остается мало исследованным. Как показано в [17], прочностные характеристики системы Fe—Cu немонотонно зависят от времени отжига, их максимальное значение достигается для размера выделений ~ 5 nm, при котором выделения оказываются нестабильными относительно ОЦК—9R-перехода. Для выяснения роли фазовой нестабильности частиц ОЦК-Cu в упрочнении необходимо исследовать изменение атомной структуры выделений при их взаимодействии с дислокациями.

Согласно результатам моделирования методом молекулярной динамики (MD) [20], случайно распределенные атомы Cu в матрице Fe могут оказывать заметное влияние на движение дислокаций, приводя к твердорастворному упрочнению. В [7,21–28] методом MD изучено взаимодействие дислокаций с вектором Бюргерса $a/2\langle 111 \rangle$ краевой, смешанной и винтовой ориентации со сферическими когерентными выделениями Cu диаметром $D = 0.7–7$ nm. Установлено, что для малых размеров $D < D_C$ частицы сохраняют ОЦК-решетку, и упрочнение обусловлено механизмом пересечения выделений дислокациями. Критический размер D_C изменяется в пределах от 1.8 до 6.6 nm и зависит от выбора потенциала межатомного взаимодействия в сплаве Fe—Cu. С ростом размера выделений для $D \geq D_C$ обнаружена перестройка структуры выделений, обусловленная развитием фазовой нестабильности, инициированной полями напряжений дислокаций [22–28].

В рамках используемой в работах [22–26] модели одновременно с реализацией структурной неустойчивости выделений Cu происходит смена механизма взаимодействия дислокации с выделением: от механизма перерезания частиц к механизму их огибания. Переход к механизму огибания приводит к тому, что достигаемое упрочнение оказывается меньше, чем возможное упрочнение по модульному механизму при тех же размерах выделений. Этот вывод получен при использованных в работах [22–26] параметрах (размер, объемная доля выделений) и условиях проведения MD-моделирования. Можно ожидать, что при других параметрах механизм перерезания может быть реализован для выделений с размерами $D > D_C$. Подобный механизм взаимодействия дислокаций с выделениями детально не исследован.

В настоящей работе взаимодействие дислокаций с обогащенными медью выделениями механизмом перерезания исследовано в широком интервале их размеров $D = 2.5–7.0$ методом MD. Проведен количественный анализ структурного состояния выделений при изменении их размера. Выявлены причины резкого возрастания деформирующего напряжения в интервале размеров выделений, при котором они оказываются нестабильными относительно ОЦК–9R-перехода, что позволяет объяснить особенности дисперсного упрочнения сплава Fe–Cu. Особое внимание уделено рассмотрению вопроса о воспроизводимости структурного состояния выделения после прохождения через него дислокации.

2. Потенциал межатомного взаимодействия и равновесные параметры твердого раствора Fe–Cu

Выбор потенциалов межатомного взаимодействия, адекватно описывающих свойства исследуемой системы, играет ключевую роль в моделировании больших атомных систем методом молекулярной динамики. Нами были использованы многочастичные потенциалы, построенные в схеме погруженного атома [29], в которой энергия сплава дается выражением

$$E = \sum_i \left\{ \sum_j V_{\text{Fe-Fe}}(R_{ij}) + V_{\text{Cu-Cu}}(R_{ij}) + V_{\text{Fe-Cu}}(R_{ij}) \right\} + F_{\text{Fe}}(\rho_i) + F_{\text{Cu}}(\rho_i), \quad (1)$$

где $V_{\text{Fe-Fe}}(R_{ij})$, $V_{\text{Cu-Cu}}(R_{ij})$, $V_{\text{Fe-Cu}}(R_{ij})$ — функции, описывающие парное взаимодействие атомов двух сортов, $F_{\text{Fe}}(\rho_i)$, $F_{\text{Cu}}(\rho_i)$ — так называемые функции погружения, ρ_i — полная электронная плотность, создаваемая на i -м атоме всеми атомами окружения,

$$\rho_i = \sum_j \rho_{\text{Fe}}(R_{ij}) + \rho_{\text{Cu}}(R_{ij}). \quad (2)$$

Здесь $\rho_{\text{Fe}}(R_{ij})$ и $\rho_{\text{Cu}}(R_{ij})$ — электронные плотности в окрестности ионов Fe и Cu. Для Fe–Fe-взаимодействий

мы использовали потенциал [30], который обеспечивает хорошее описание равновесных свойств ОЦК-Fe. Для Cu был выбран потенциал [31], при построении которого использовались результаты расчетов *ab initio*; он корректно предсказывает неустойчивость решетки ОЦК-Cu и дает правильное соотношение между энергиями ОЦК- и ГЦК-фаз.

Парная функция взаимодействия между Fe и Cu $V_{\text{Fe-Cu}}(R_{ij})$ была построена как суперпозиция вкладов отдельных элементов в виде, предложенном в [32],

$$V_{\text{Fe-Cu}}(R_{ij}) = h(x)(V_{\text{Fe}}(R_{ij}) + V_{\text{Cu}}(R_{ij})). \quad (3)$$

Такая схема описания взаимодействия между компонентами сплава часто применяется при моделировании твердых растворов [33]. Функция $h(x)$, зависящая от концентрации сплава x , выбирается в виде разложения по степеням x , а коэффициенты разложения определяются так, чтобы обеспечить наилучшее согласие рассчитанных и экспериментальных значений равновесных параметров сплава. В настоящей работе выбор $h(x)$ проводился на основании сопоставления с результатами *ab initio* расчетов [19] концентрационной зависимости параметра решетки, упругих модулей и энергии смешения. Как показал проведенный анализ, функция $h(x)$ остается постоянной вплоть для значений $x \sim 0.7$, а при $x > 0.7$ монотонно возрастает. Поэтому в дальнейшем мы полагали $h(x) = k$, а константа k варьировалась в пределах $0.3 < k < 0.7$. Оптимальное значение k определялось из сравнения рассчитанных концентрационных зависимостей равновесных параметров сплава с результатами расчетов *ab initio*.

На рис. 1 представлена зависимость энергии смешения E_{mix} от концентрации Cu в твердом растворе

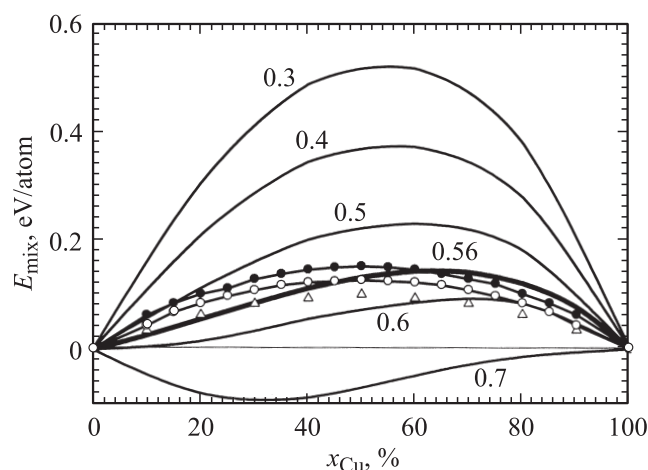


Рис. 1. Зависимость энергии смешения от концентрации Cu в твердом растворе сплава Fe–Cu с ОЦК-решеткой для различных значений параметра k в пределах $0.3 < k < 0.7$. Треугольники соответствуют расчетам E_{mix} для потенциала, предложенного в [23], кружки — результатам расчетов в рамках теории функционала электронной плотности [19] для ферромагнитного (темные) и парамагнитного (светлые) состояний.

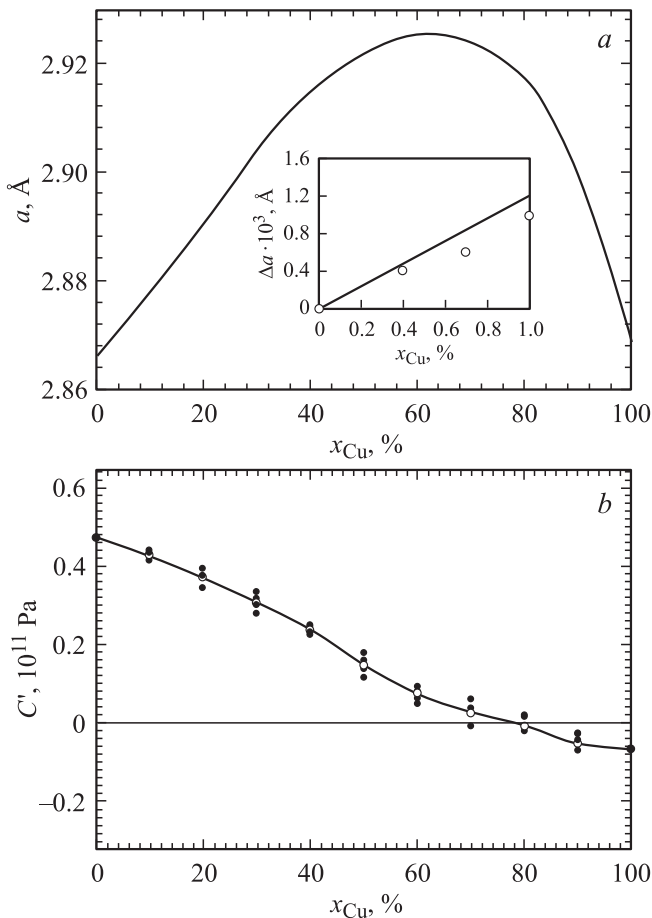


Рис. 2. Зависимость параметра решетки (а) и модуля сдвига $C' = C_{11} - C_{12}$ (b) от концентрации Cu в твердом растворе сплава Fe–Cu. Атомы меди распределены случайно (равновероятно) по позициям ОЦК-решетки. Темные точки для каждой концентрации сплава на части b отвечают различным вариантам случайного распределения атомов Cu при заданной их концентрации; кривая проведена по их среднему значению (светлые точки).

сплава Fe–Cu с ОЦК-решеткой. В интервале концентраций меди $0 < x < 50\%$ при $k = 0.56 - 0.58$ зависимость энергии смешения $E_{\text{mix}}(x)$ хорошо согласуется с полученной для потенциала, предложенного в [23], а также с результатами расчетов в рамках теории функционала электронной плотности [19]. Величина E_{mix} велика и положительна (максимальное значение $E_{\text{mix}} \sim 120$ meV/at при $k = 0.56$), что отвечает выраженной тенденции к распаду в системе Fe–Cu.

На рис. 2 представлены результаты расчета концентрационных зависимостей параметра решетки и упругих модулей для твердых растворов сплава Fe–Cu, описываемых потенциалом с $k = 0.56$. Видно, что параметр решетки (рис. 2, а) для твердых растворов Fe–Cu изменяется немонотонно при увеличении концентрации Cu (максимальное значение $\delta a/a \sim 2\%$ достигается при 65 at.% Cu), демонстрируя значительное отклонение от закона Vegarda. Величина концентрационного расшире-

ния сплава da/dx для концентрации $x < 50\%$ оказывается значительно больше, чем обычно оцениваемая по закону Vegarda (при $x = 0$ и 100% значения параметров решетки практически совпадают вследствие близости ионных радиусов Fe и Cu). Такое поведение согласуется с результатами *ab initio* расчетов [19] и с экспериментальными данными [34] (см. вставку на рис. 2, а).

На рис. 2, b показана рассчитанная зависимость сдвигового модуля $C' = C_{11} - C_{12}$ от концентрации Cu в ОЦК-Fe для потенциала с $k = 0.56$. Величина модуля C' оказалась весьма чувствительной к распределению атомов Cu и для получения достоверной величины C' потребовалось использовать достаточно большой кристаллит (пять точек для каждой концентрации сплава на рис. 2, b отвечают различным вариантам случайного распределения атомов Cu при заданной их концентрации).

Важной особенностью является то, что величина модуля C' падает с ростом концентрации меди и обращается в нуль при $x_{Cu} \sim 80\%$. Эта особенность ранее была получена в [19] с использованием *ab initio* методов расчета и отражает сдвиговую неустойчивость меди относительно ОЦК–ГЦК-превращения. Следует отметить, что отрицательное значение модуля C' означает неустойчивость однородного сплава относительно малых деформаций, искажающих ОЦК-решетку по направлению к ГЦК. В то же время ОЦК–ГЦК-превращению в обогащенных медью выделениях будет препятствовать окружающая матрица ОЦК-Fe, и, следовательно, условия потери устойчивости будут иными.

Были рассчитаны также изменения энергии сплава Fe–Cu в зависимости от величины тетрагональной бейновской деформации, описывающей перестройку ОЦК- (отношение $c/a = 1/\sqrt{2}$) в ГЦК-решетку ($c/a = 1$). Оказалось, что уже при концентрации Cu 30% ГЦК-структура сплава становится предпочтительной. С увеличением содержания Cu энергетический барьер превращения понижается и обращается в нуль для сплава Fe–70Cu, что отражает сдвиговую неустойчивость ОЦК-сплава Fe–Cu (рис. 2, b) при содержании Cu более 70%.

3. Взаимодействие дислокаций с выделениями

Согласно существующим представлениям [35], упрочнение дисперсными выделениями обусловлено сопротивлением движения дислокаций, которое они испытывают при пересечении частиц второй фазы. Величина упрочнения определяется размером выделений, их объемной долей и энергией ΔE , которую необходимо затратить для перерезания дислокацией отдельного выделения. Для выяснения механизмов, определяющих изменение энергии при движении дислокации через частицу, мы провели MD-моделирование для кристаллита (рис. 3) ОЦК-Fe, содержащего дислокацию и выделение Cu сферической формы. Рассматривалась краевая

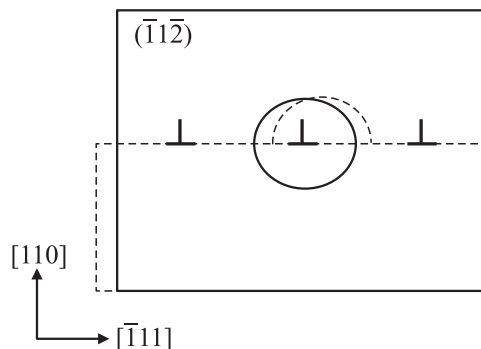


Рис. 3. Схема кристаллита для моделирования взаимодействия краевой дислокации с выделением. Показаны различные положения дислокации при ее движении в кристаллите.

дислокация с вектором Бюргерса $1/2[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, скользящая в плоскости (110). Ось OX модельного кристаллита параллельна вектору Бюргерса дислокации, ось OY совпадает с нормалью к плоскости скольжения, ось OZ направлена вдоль линии дислокации $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$. Вдоль направлений OX , OY выбирались фиксированные граничные условия, вдоль OZ — периодические граничные условия. В центре кристаллита помещалось выделение Cu заданного размера. Вдоль всех трех направлений размер кристаллита был достаточно большим (число атомов в кристаллите составляло $\sim 3 \cdot 10^5$), чтобы исключить влияние граничных условий.

При введении краевой дислокации в кристаллит сначала одна его часть, выше плоскости скольжения, сдвигалась относительно другой на величину $b/2$ (b — вектор Бюргерса дислокации), а затем накладывались смещения, создаваемые дислокацией в соответствии с изотропной теорией упругости. При этом на одной из поверхностей кристаллита образовывалась ступенька высотой, равной вектору Бюргерса дислокации (рис. 3). Энергия взаимодействия дислокации с выделением ΔE определялась как работа (на единицу длины), необходимая для перемещения дислокации из удаленного положения на расстояние X от центра выделения:

$$\Delta E = (E_{d+p}(X) - E_d - E_p + E_0)/L, \quad (4)$$

где E_{d+p} — энергия кристаллита, содержащего выделение Cu и дислокацию, E_d , E_p и E_0 — энергии кристаллита с дислокацией, кристаллита с выделением Cu и кристаллита ОЦК-Fe, L — длина кристаллита в направлении оси Z . Соотношение (4) предполагает сохранение числа атомов при введении дислокации в кристаллит, что обеспечивается описанной выше процедурой его построения. Для каждого из положений оси дислокации в плоскости скольжения проводилась структурная релаксация, определялись полная энергия и смещения атомов в матрице и выделении. В процессе релаксации не наблюдалось смещения оси дислокации относительно первоначально заданного положения. Ис-

пользуемая схема моделировала процесс перерезания дислокацией выделения.

В модели Фриделя [36], рассматривающей механизм перерезания выделений, критическое сдвиговое напряжение

$$\tau_c = C \frac{F_{\max}^{3/2} f^{1/2}}{Db(2\pi S)^{1/2}} \quad (5)$$

зависит от характеристик дислокации (b — величина вектора Бюргерса, S — линейное натяжение дислокации), объемной доли f и размера частиц D , C — константа ~ 1 . Характер взаимодействия дислокаций с выделениями определяется модулем максимального значения силы взаимодействия

$$F_{\max} = \left(\frac{\partial \Delta E(x)}{\partial x} \right)_{\max},$$

где $\Delta E(x)$ — зависимость энергии взаимодействия дислокации с выделением от расстояния x между выделением и дислокацией в плоскости ее скольжения.

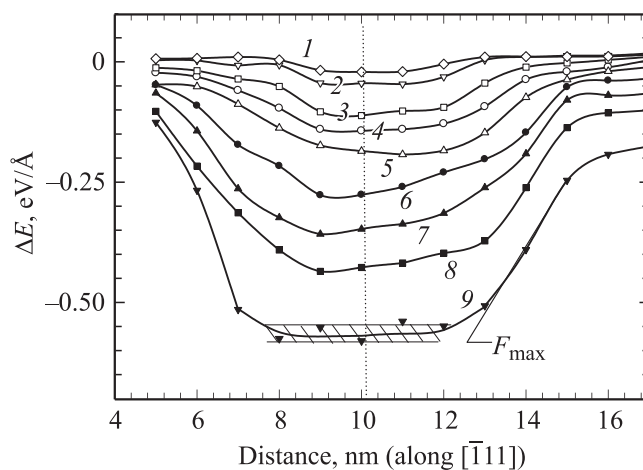


Рис. 4. Энергия взаимодействия (на единицу длины) дислокации с выделением. Размер выделений изменяется в пределах от $D = 2.5$ (кривая 1) до 7.0 nm (кривая 9).

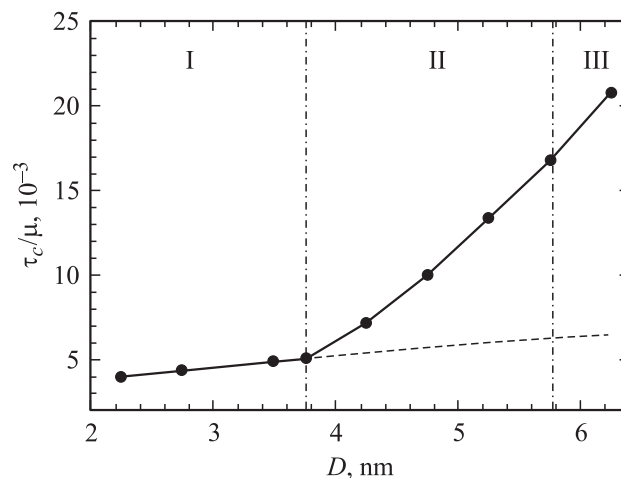


Рис. 5. Зависимость результирующего сдвигового напряжения τ_c/μ от размера выделения D .

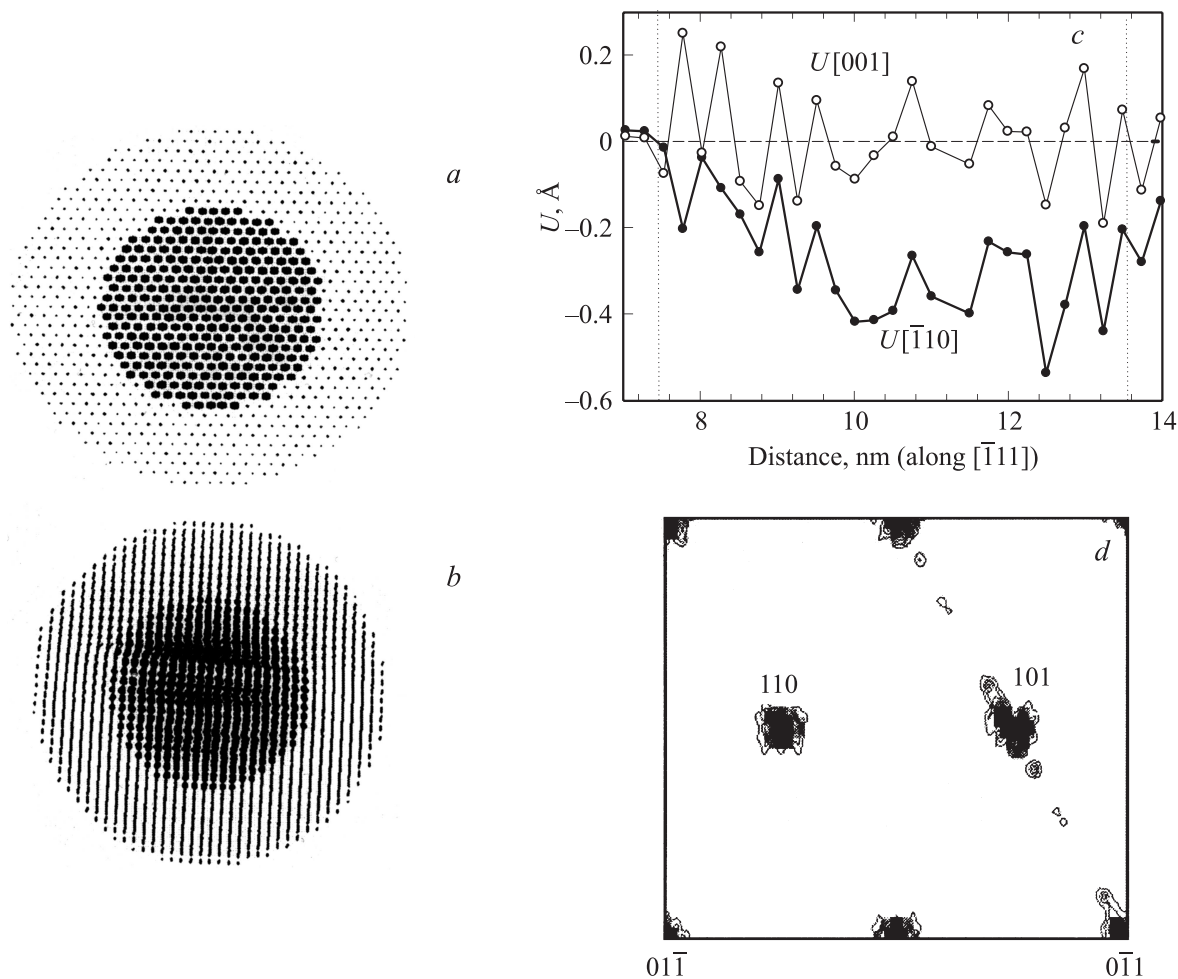


Рис. 6. Фрагмент кристаллита, содержащий частицу Cu диаметром 5.2 nm в ОЦК-Fe без дислокации (a) и с краевой дислокацией внутри частицы (b). Показаны проекции атомов выделения и атомов окружающей матрицы. c — смещения внутри частицы с дислокацией в центре, d — картина дифракции с осью зоны $[\bar{1}11]$.

На рис. 4 представлена энергия взаимодействия ΔE в зависимости от расстояния между дислокацией и выделением Cu (положение центра частицы отмечено вертикальной пунктирной линией), полученная путем MD-моделирования. Кривые 1–9 соответствуют различным размерам выделения D от 2.5 до 7.0 nm (число атомов Cu изменяется от 511 до 10890). Проникновение дислокации внутрь выделения сопровождается выигрышем в энергии, величина которого растет с увеличением размера выделения.

На рис. 5 представлена зависимость результирующего сдвигового напряжения τ_c от размера выделений, вычисленная по формуле (5). В зависимости от D можно выделить три области, в которых механизм взаимодействия дислокации с выделением качественно различен.

Для малых частиц в интервале размеров $2.5 < D < 4.4$ nm (кривые 1–4 на рис. 4, область I на рис. 5) энергия взаимодействия относительно мало изменяется с увеличением их размера. В этом случае понижение энергии дислокации обусловлено релакса-

цией упругих напряжений внутри выделения, в котором величина модуля сдвига на 40% ниже, чем для ОЦК-Fe (для используемых межатомных потенциалов величина усредненных по Фойгту модулей сдвига $\mu_{Fe} = 86$ и $\mu_{Cu} = 50$ GPa). В отсутствие дислокации частица, помещенная в матрицу Fe, вызывает радиальные смещения, которые обусловлены концентрационным расширением вследствие различия равновесных значений параметров решеток ОЦК-Cu и Fe. Проникновение дислокации внутрь частицы сопровождается упругими деформациями, локализованными вблизи ее ядра; выделения меди сохраняют ОЦК-структуру. Таким образом, в случае малых выделений два механизма дают вклад в упрочнение: 1) создаваемые частицей поля упругих напряжений; 2) механизм модульного взаимодействия дислокации с частицей [37]. Деформирующее напряжение $\tau_c (\Delta\mu/\mu)$, обусловленное модульным взаимодействием дислокации с выделением, для которого максимальное значение силы пропорционально разности упругих модулей

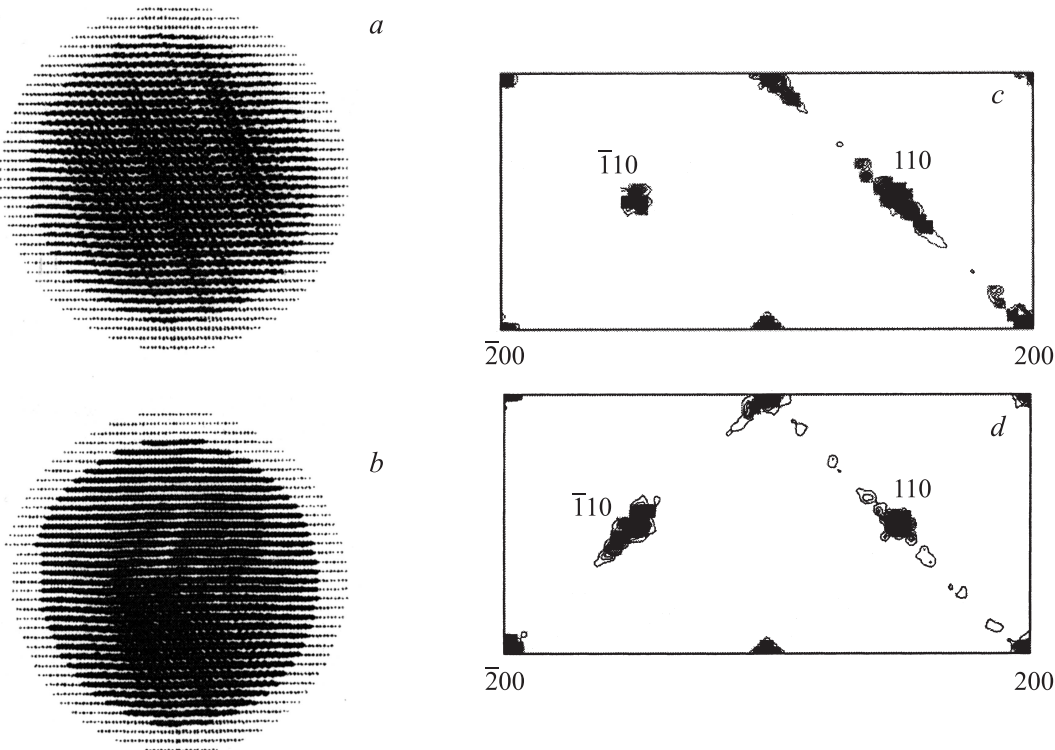


Рис. 7. Структура частицы Cu размером $D = 6.25$ nm в ОЦК-Fe без дислокации (*a*) и с краевой дислокацией внутри частицы (*b*). *c*, *d* — соответствующие картины дифракции с осью зоны $[001]$, полученные для выделения.

матрицы и выделения $F_{\max} \sim \Delta\mu/\mu$, имеет вид [38]

$$\tau_c(\Delta\mu/\mu) = \alpha \left(\frac{D}{b} \right)^\beta, \quad (6)$$

где α , β — константы (константа $\alpha \sim \Delta\mu/\mu$, $\beta \sim 0.5$). На рис. 5 штриховой линией представлена зависимость $\tau_c(\Delta\mu/\mu)$, построенная графически по данным MD-моделирования критического результирующего сдвигового напряжения для размеров выделений $D < 4.4$ nm.

Для более крупных выделений с размерами в интервале $4.4 \leq D < 6.2$ nm критическое результирующее сдвиговое напряжение τ_c и наклон кривой зависимости $\tau_c(D)$ резко возрастают по сравнению с модульным взаимодействием (штриховая линия на рис. 5). В этой области размеров в отсутствие дислокации частица Cu внутри матрицы Fe сохраняет ОЦК-структуру (рис. 6, *a*). Однако введение дислокации внутрь частицы приводит к развитию в ней структурной неустойчивости (рис. 6, *b*). На рис. 6, *c* показана зависимость компонент смещений $U[\bar{1}10]$ и $U[001]$ от расстояния вдоль направления $[\bar{1}11]$, принадлежащих одной из плоскостей в выделении. Компонента $U[\bar{1}10]$ в плоскости, параллельной плоскости скольжения дислокации (110), сохраняет знак внутри частицы, что свидетельствует о развитии сдвиговой деформации вследствие структурной неустойчивости выделения ОЦК-Cu. Компонента смещений $U[001]$, а также компонента смещений, перпендикулярная плоскости (110), осциллируют вблизи нуля,

оставаясь значительно меньше компоненты смещений $U[\bar{1}10]$, лежащей в плоскости (110). Вследствие стесненности выделения Cu в матрице ОЦК-Fe величина смещений остается меньше необходимой для локальной ОЦК-9R-перестройки решетки, однако их геометрия соответствует сдвиговой деформации, осуществляющей превращение.

Для атомов, принадлежащих выделению, вычислен статический структурный фактор [39] и рассчитаны дифракционные картины для различных сечений обратной решетки. Такие картины могут быть непосредственно сопоставлены с микродифракциями, получаемыми при электронно-микроскопических исследованиях [40]. На рис. 6, *d* представлена дифракционная картина для оси зоны $[\bar{1}11]$, рассчитанная для сетки 80×80 векторов обратной решетки. Можно отметить существенное различие между расчетными изображениями (рис. 6, *d*) и идеальными дифракционными картинами. Отсутствуют экстрарефлексы, соответствующие 9R-фазе [41]; видны лишь тяжи вблизи основных рефлексов ОЦК-фазы. Кроме того, тяжи вблизи основных рефлексов ОЦК-фазы наблюдаются не только на дифракциях с осями зон $\langle 111 \rangle$, но также и в направлениях $\langle 110 \rangle$ обратной решетки ОЦК-фазы во всех других осях зоны, которые содержат этот рефлекс. Менее протяженные тяжи наблюдаются также в направлениях $\langle 112 \rangle$, принадлежащих плоскости (110) обратной решетки, что свидетельствует о неоднородности сдвигов в плоскостях структурной

неустойчивости. Описанная выше картина распределения тяжей вблизи основных рефлексов исходной фазы, не проходящих через начало координат обратной решетки, характерна для предпереходного метастабильного состояния. Подобные явления хорошо изучены экспериментально на электронной дифракции и наблюдаются в ряде сплавов, испытывающих в массивном состоянии мартенситное превращение [42]. Таким образом, поля напряжений дислокации инициируют метастабильное предпереходное ОЦК–9R-состояние внутри выделения, которое остается когерентно связанным с матрицей.

С целью выяснить, как изменяется структурное состояние частицы после прохождения дислокации, в кристаллит, содержащий дислокацию в центре частицы (рис. 6, *b*), вводилась дислокация противоположного знака и проводилась его дополнительная релаксация. Показано, что в частице восстанавливается ОЦК-структура; предпереходное метастабильное состояние, вызванное полями напряжений дислокации, исчезает.

Для частиц размером $6.2 \leq D < 7.0 \text{ nm}$ их равновесная конфигурация уже в отсутствие дислокации демонстрирует ОЦК–9R-структурную неустойчивость. Для сферического выделения эта неустойчивость может развиваться в любой из плоскостей $\{110\}$. Взаимодействии дислокации с таким выделением зависит от взаимной ориентации плоскости скольжения дислокации и плоскости, в которой развивается собственная сдвиговая неустойчивость частицы, что дает различающиеся значения τ_c . В случае параллельности этих плоскостей поля напряжений дислокации приводят к увеличению смещений, осуществляющих ОЦК–9R-превращение, усилению взаимодействия дислокации с частицей и разбросу значений энергии ΔE в зависимости от положения линии дислокации внутри частицы (заштрихованная область на кривой 9, рис. 4). Величина упрочнения в области III возрастает более чем в 3 раза (рис. 5) по сравнению со значениями, которые достигаются для тех же размеров выделения при модульном взаимодействии (штриховая линия). Если же плоскость, в которой развивается сдвиговая неустойчивость, и плоскость скольжения дислокации не параллельны (рис. 7, *a, c*), поля напряжений дислокации приводят к появлению второго домена со смещениями другой ориентации (рис. 7, *b, d*). Расчеты показывают, что критическое результирующее напряжение в этом случае примерно вдвое превосходит значение, представленное для того же размера выделений на рис. 5.

4. Заключение

С целью выяснения механизма упрочнения в сплавах Fe–Cu методом молекулярной динамики изучено взаимодействие дислокаций с выделениями меди в ОЦК-железе. Построенные нами межатомные потенциалы, как и использованные в предыдущих работах [20–26], дают близкие значения параметров решетки для ОЦК-фаз

железа и меди, но значительно различающиеся упругие модули этих фаз. В результате модульный механизм взаимодействия дислокаций с выделениями оказывается доминирующим при их малых размерах.

В отличие от предыдущих работ используемые нами потенциалы межатомного взаимодействия дают (в согласии с результатами *ab initio* расчетов [17]) падение сдвигового модуля C' и обращение его в нуль при концентрации Cu $x_{\text{Cu}} \sim 80\%$. Отрицательное значение C' отражает структурную неустойчивость ОЦК-меди относительно ОЦК–ГЦК-превращения, которая развивается при увеличении размеров выделений.

Механизм перерезания при взаимодействии дислокаций с выделениями изучен в интервале размеров выделений $2.5 < D < 7.0 \text{ nm}$. Показано, что для малых размеров выделений $2.5 < D < 4.4 \text{ nm}$ основной вклад в упрочнение дает модульное взаимодействие дислокаций с выделениями, что согласуется с результатами других исследований [7,21–26]. Для размеров $4.4 < D < 6.2 \text{ nm}$ поля напряжений дислокации инициируют развитие структурной неустойчивости выделения. Анализ смещений и дифракционных картин позволяет характеризовать структуру выделений в этой области размеров как предпереходное метастабильное состояние относительно ОЦК–9R-превращения (рис. 6). В результате дислокация оказывается захваченной внутри выделения, что приводит в случае механизма перерезания к значительному возрастанию величины τ_c по сравнению с модульным взаимодействием (рис. 5). Изменение структурного состояния частицы перестает давать вклад в упрочнение, если механизм перерезания выделений сменяется механизмом огибания (см., например, рис. 3 в работе [25]). Это может объяснять тот факт, что максимальное упрочнение достигается при определенном размере выделений [6–8].

В области размеров $D \geq 6.2 \text{ nm}$ структурная неустойчивость развивается в выделении уже в отсутствие дислокации (рис. 7). В этом случае дислокация может встречать в плоскости скольжения препятствия разной мощности, различающиеся ориентацией плоскостей, в которых развивается ОЦК–9R-неустойчивость. Спектр этих препятствий будет определять значение суммарного деформирующего напряжения.

В случае механизма перерезания важным является вопрос о том, происходит ли восстановление структуры выделения после прохождения дислокации. Проведенное MD-моделирование показало, что во всем исследованном интервале размеров начальное состояние выделения восстанавливается после прохождения дислокации, т. е. механизм упрочнения воспроизводится в течение всего процесса деформации.

Хотя распределение смещений в ядре дислокации изменяется при ее переходе из матрицы в выделение, качественной перестройки типа расщепления в исследованном интервале размеров выделений не наблюдалось. Рассматриваемый механизм дисперсионного упрочнения будет отсутствовать в случае малых и больших частиц,

которые имеют устойчивую ОЦК- или 9R/ГЦК-структуру. В этих случаях присутствие дислокации внутри частицы не может изменить структуру фазы выделения. Движение дислокации через выделение возможно только после прохождения дислокационных реакций на межфазной границе, которые определяются ориентационной связью между фазами выделения и матрицы.

Список литературы

- [1] R.W. Cahn, P. Haasen. *Physical metallurgy*. North Holland (1996).
- [2] H.-J. Kestenbach, S.S. Campos, E.V. Morales. *Mater. Sci. Technol.* **22**, 615 (2006).
- [3] K.B. Kang, O. Kwon, W.B. Lee, C.G. Park. *Scripta Mater.* **36**, 1303 (1997).
- [4] D. Isheim, R.P. Kolli, M.E. Fine, D.N. Seidman. *Scripta Mater.* **55**, 35 (2006).
- [5] S. Vaynman, I. Uslander, M.E. Fine. *Proc. of 39th Mechanical Working and Steel Processing Conf. ISS, Indianapolis, Indiana* (1997). P. 1183; S. Vaynman, R.S. Guico, M.E. Fine, S.J. Manganello. *Met. Trans.* **28A**, 1274 (1997).
- [6] S.K. Lahiri, M.E. Fine. *J. Met.* **21**, A 132 (1969).
- [7] T. Harry, D.J. Bacon. *Acta Mater.* **50**, 195 (2002); **50**, 209 (2002).
- [8] M.E. Fine, J.Z. Liu, M.D. Asta. *Mater. Sci. Eng. A* **463**, 271 (2007).
- [9] G. Salge, M. Feller-Knipmeier. *J. Appl. Phys.* **48**, 1833 (1977).
- [10] L.H. Chen, T.S. Chin, M. Hung. *J. Appl. Phys.* **64**, 5962 (1988).
- [11] S.R. Goodman, S.S. Brenner, J.R. Low. *Met. Trans.* **4**, 2371 (1973).
- [12] F. Maury, N. Lorenzelli, C.-H. de Novion, P. Lagarde. *Scripta Met. Mater.* **25**, 1839 (1991).
- [13] P.J. Othens, M.L. Jenkins, G.D.W. Smith. *Phil. Mag. A* **70**, 1 (1994).
- [14] A. Barby, T.N. Le, N. Lorenzelli, F. Maury, C.-H. de Novion. *Ann. Chim. (France)* **16**, 333 (1991).
- [15] P. Auger, P. Pareige, M. Akamatsu, D. Blavette. *J. Nucl. Mater.* **225**, 225 (1995).
- [16] H.A. Hardouin Duparc, R.C. Dole, M.L. Jenkins, A. Bardu. *Phil. Mag. Lett.* **71**, 325 (1995).
- [17] A. Deschamps, M. Militzer, W.J. Poole. *ISIJ Int. (Japan)* **41**, 196 (2001).
- [18] O.D. Isheim, M.S. Gagliano, M.E. Fine, D.N. Seidman. *Acta Mater.* **54**, 841 (2006).
- [19] J.Z. Liu, A. van de Walle, G. Ghosh, M. Asta. *Phys. Rev. B* **72**, 1 (2005).
- [20] K. Topasa, D.J. Bacon, Yu.N. Osetsky. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **14**, 1153 (2006).
- [21] S. Nedelcu, P. Kizler, S. Schmauder, N. Moldovan. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **8**, 181 (2000).
- [22] S.Y. Hu, S. Schmauder, L.Q. Chen. *Phys. Status Solidi B* **220**, 845 (2000).
- [23] M. Luwig, D. Farkas, D. Pedraza, S. Schmauder. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **6**, 19 (1998).
- [24] J.-H. Shim, Y.W. Cho. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 021 906 (2007).
- [25] D.J. Bacon, Yu.N. Osetsky. *Phil. Mag.* **89**, 3333 (2009).
- [26] Z. Chen, N. Kioussis. *Phys. Rev. B* **80**, 184 104 (2009).
- [27] I.N. Karkin, Yu.N. Gornostyrev, L.E. Karkina. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **25**, 164 (2010).
- [28] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. *Изв. РАН. Сер. физ.* **74**, 701 (2010).
- [29] M.S. Daw, M.I. Baskes. *Phys. Rev. B* **29**, 6443 (1984).
- [30] V. Shastri, D. Farkas. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **408**, 217 (1996).
- [31] Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress. *Phys. Rev. B* **63**, 224 106 (2001).
- [32] A. Caro, D.A. Crowson, M. Caro. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 075 702 (2005).
- [33] A. Caro, M. Caro, E.M. Lopasso, P.E.A. Tuci, D. Farkas. *J. Nucl. Mater.* **349**, 317 (2006).
- [34] H.A. Wriedt, L.S. Darken. *Trans. Met. Soc. AIME* **218**, 30 (1960).
- [35] П. Хаазен. В кн.: *Физическое металловедение. Металлургия, М.* (1987). Т. 3. С. 187.
- [36] Ж. Фридель. *Теория дислокаций*. Мир, М. (1967). 643 с.
- [37] K.C. Russel, L.M. Brown. *Acta Met.* **20**, 969 (1972).
- [38] E. Nembach. *Phys. Status Solidi A* **78**, 571 (1983).
- [39] B.L. Zhang, C.Z. Wang, K.M. Ho, D. Turner, Y.T. Ye. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1375 (1995).
- [40] J.J. Blackstock, G.L. Ackland. *Phil. Mag. A* **81**, 2127 (2001).
- [41] S. Kajiwara, Z. Nishiyama. *Jpn. J. Appl. Phys.* **3**, 749 (1964).
- [42] В.Г. Пушин, В.В. Кондратьев, В.Р. Хачин. *Предпереходные явления и мартенситные превращения*. Екатеринбург. (1998). 367 с.