

01:05

©1994 г.

СТРУКТУРА ЯДРА ДИСЛОКАЦИИ В ИРИДИИ И РОДИИ

Л.И.Яковенкова, Ю.Ф.Шаманаев, Л.Е.Карькина

Институт физики металлов, 620219, Екатеринбург
(Поступило в Редакцию 10 ноября 1993 г.)

Методом компьютерного моделирования исследована структура ядра винтовой и краевой $a/2(110)$ дислокаций в иридии и родии. Моделирование проводилось для двух начальных конфигураций: практически нерасщепленной и расщепленной по теории упругости. Показано, что результаты моделирования зависят от исходной конфигурации. В первом случае ядро дислокации существенно более узкое, чем можно было ожидать из упругостных расчетов. Обсуждается влияние двух конфигураций на экспериментально наблюдаемые особенности деформационных характеристик.

Иридий обладает удивительной особенностью: будучи ГЦК металлом, он разрушается сколом после значительной пластической деформации [1]. Максимальное удлинение до разрушения, которое достигнуто для монокристалла иридия, составляет 77% [2]. Среди всех ГЦК металлов хрупкое разрушение обнаружено только для иридия и родия [3]. Деформационные кривые монокристаллов иридия являются типичными для ГЦК металлов и имеют в качестве второй стадии пластической деформации протяженную стадию линейного упрочнения [4]. Однако сравнение деформационных кривых иридия и меди [5] показывает, что для иридия сопротивление сдвигу и коэффициент линейного упрочнения значительно выше. Но кривые, дающие деформационную зависимость отношения напряжения к модулю сдвига для иридия и меди, оказались близкими.

В критерии хрупкого разрушения Райса и Томпсона [6] кроме упругих модулей входит такая величина, как радиус ядра дислокации, для которой обычно используются полуэмпирические оценки. Поэтому необходимо было провести микроскопические расчеты структуры ядра дислокации. Кроме того, важно знать, является ли ядро дислокации плоским или имеет более сложную конфигурацию. Для расщепленных дислокаций важными характеристиками кроме величины расщепления являются радиус ядра частичных дислокаций и степень перекрытия их ядер.

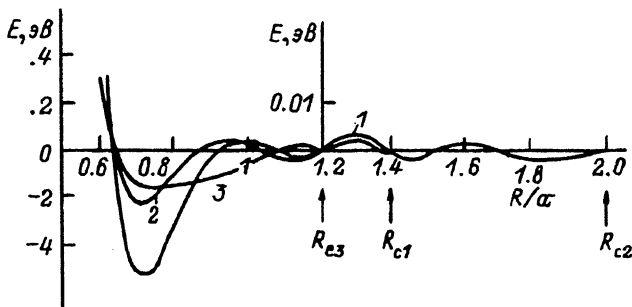


Рис. 1. Парные потенциалы взаимодействия.

1 — иридий ($R_c = 1.386a$); 2 — родий ($R_c = 1.975a$); 3 — медь ($R_c = 1.21a$). Для $R > 1.2a$ значения E увеличены в 20 раз (a — параметр решетки).

При моделировании ядра дислокации были использованы построенные нами парные потенциалы межатомного взаимодействия для иридия и родия с использованием простой теории возмущений по локальному псевдопотенциалу [7,8]. Рассчитанные с этими потенциалами упругие модули оказались достаточно близкими к наблюдаемым [9], а энергия активации самодиффузии, вычисленная как сумма энергии образования $E_v^f = 1.64$ эВ и энергии миграции $E_v^m = 3.05$ эВ вакансии, оказалась в хорошем согласии с экспериментально наблюдаемым значением энергии самодиффузии в иридии $E_v^{sd} = 4.55$ эВ [10].

На рис. 1 представлены парные потенциалы взаимодействия, использованные в данной работе для иридия (кривая 1) [8], для родия (кривая 2) [7] и для сравнения дан парный потенциал взаимодействия для меди [11].

Радиус обрезания потенциала R_c для иридия был выбран равным $1.391a$ и равным $1.975a$ для родия (a — параметр решетки).

Можно видеть, что положение минимума потенциала для иридия и родия почти точно совпадает с положением первых ближайших соседей; минимальное значение более низкое для иридия и родия, чем для меди. Значение производной вблизи минимума для иридия и родия более высокое по сравнению с медью, что может оказаться существенным при моделировании ядра дислокаций в этих металлах.

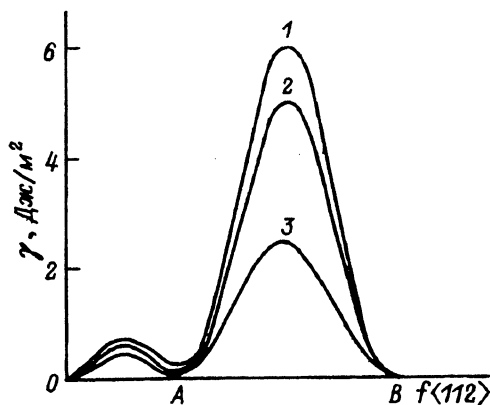


Рис. 2. Зависимость энергии дефекта упаковки от величины сдвига для потенциала иридия (1), родия (2) и меди (3).

Для данных потенциалов была вычислена энергия обобщенного поверхностного дефекта упаковки в плоскости октаэдра, характеризующая вектором сдвига \mathbf{f} . Оказалось, что для них соответствующая γ поверхность имеет один локальный минимум в точке A , соответствующий сдвигу $\mathbf{f} = a/6\langle 112 \rangle$, и минимум, соответствующий трансляции решетки с вектором сдвига $a/2\langle 112 \rangle$, в точке B , который является периодом идентичности в этом направлении (рис. 2). Это свидетельствует о том, что единственным стабильным дефектом является дефект упаковки с \mathbf{f} вектором $a/6\langle 112 \rangle$, поскольку появление дополнительных минимумов могло бы привести к другим типам расщепления. Соответствующие минимуму значения энергии дефекта упаковки оказались равными 140 и 87 мДж/м² для иридия и родия соответственно, что хорошо согласуется с полученными значениями энергий дефектов упаковки в других моделях для этих металлов. К сожалению, мы не имеем достаточно надежных сведений о величине энергии дефекта упаковки в этих металлах. Имеющиеся экспериментальные данные, например, для иридия отличаются более чем на порядок. Однако наблюдение деформационных двойников в иридии [2] дает возможность предположить, что эти энергии не слишком велики.

Как отмечалось Витеком и Кроупа [10], дислокация $1/2 [10\bar{1}]$ может быть расщеплена в плоскости (111) на частичные согласно следующей реакции:

$$\frac{1}{2}[10\bar{1}] = \left(\frac{1}{4}[10\bar{1}] + \frac{x}{12}[1\bar{2}1] \right) + \left(\frac{1}{4}[10\bar{1}] + \frac{x}{12}[\bar{1}2\bar{1}] \right). \quad (1)$$

Обычное расщепление на частичные дислокации Шокли с образованием низкоэнергетического дефекта упаковки типа вычитания реализуется при $x = 1$. Расщепление на частичные дислокации с вектором Бюргера $1/2 [10\bar{1}]$, имеющее минимальную энергию упругого взаимодействия, но более высокое значение энергии дефекта упаковки, соответствует $x = 0$. Согласно [10], реализуется расщепление с минимальной суммарной энергией упругого взаимодействия между частичными дислокациями и величины обобщенного дефекта упаковки.

Модельный кристаллит с ГЦК решеткой для винтовой дислокации имел форму прямоугольного параллелепипеда, включающего 30 плоскостей ($\bar{1}1\bar{2}$), 23 ($\bar{1}11$) и 2 плоскости (110) и содержащего 1380 атомов. В центр кристаллита вводилась винтовая дислокация с вектором Бюргера $1/2 [110]$. Модельный кристаллит для краевой дислокации представлял собой ГЦК решетку, имеющую форму прямоугольного параллелепипеда, включающего 202 плоскости (110), 33 плоскости (111) и 6 плоскостей (112) и содержащего 6666 атомов. В центр кристаллита вводилась краевая дислокация с вектором Бюргера $1/2 [1\bar{1}0]$ и осью, параллельной $[\bar{1}12]$.

Полученные ранее результаты моделирования ядра дислокаций для других ГЦК металлов не зависят от выбора начальной конфигурации [12], что связано с широким ядром частичных дислокаций и малой величиной напряжения Пайерлса. С другой стороны, известно, что для ОЦК металлов, где величина напряжения Пайерлса большая, конечный результат зависит от выбора начальной конфигурации дислокаций [13]. Отмеченные выше особенности потенциалов межатомного

взаимодействия позволили нам сделать предположения о возможных особенностях расщепления дислокаций в иридии и родии, связанные с выбором начальной конфигурации.

Рассматривались два случая. В первом случае исходные смещения рассчитывались с использованием изотропной теории упругости для расщепленных дислокаций. Во втором в качестве начальной выбиралась практически нерасщепленная дислокация.

Граничные условия были двух типов. В направлениях $[1\bar{1}0]$ и $[111]$ для краевой, $[\bar{1}11]$ и $[\bar{1}1\bar{2}]$ для винтовой дислокаций использованы жесткие граничные условия: атомы закреплялись в позициях, полученных по линейной теории упругости. Толщина закрепленного слоя выбиралась не меньше радиуса обрезания потенциала межатомного взаимодействия R_c . Вдоль направлений $[110]$ для винтовой и $[11\bar{2}]$ для краевой дислокаций, параллельных оси рассматриваемых дислокаций, на смещения накладывались периодические граничные условия.

Для выявления особенностей структуры ядра дислокаций в иридии и родии были проведены расчеты с использованием метода молекулярной динамики на кристаллитах, содержащих краевую и винтовую дислокации. В результате расчетов находились положения атомов в решетке, соответствующие минимуму энергии рассматриваемого кристаллита с введенным в него дефектом с точностью 10^{-4} эВ. Используя метод дифференциальных смещений [13] была определена область относительных смещений атомов, которая соответствует ядру дислокации.

Этот метод разработан и широко применялся для определения структуры ядра дислокации винтовой ориентации и не использовался ранее для краевой, поскольку период идентичности вдоль оси краевой дислокации составляет 6 плоскостей, что делает интерпретацию более сложной. В нашем случае для иллюстрации области ядра краевой

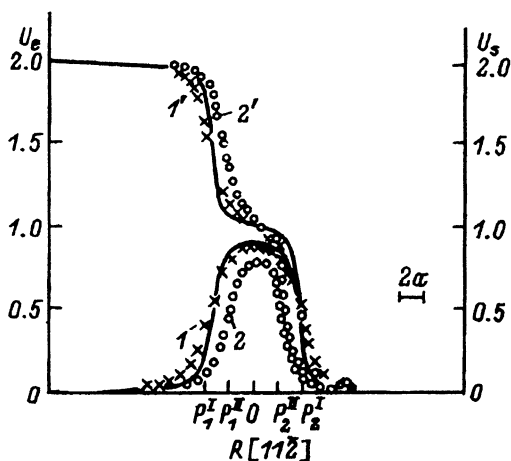


Рис. 3. Распределение винтовой (1, 2) и краевой (1', 2') компонент смещения винтовой дислокации в иридии.

Винтовая компонента смещения дана в единицах $a\sqrt{2}/4$, а краевая — $a\sqrt{6}/12$.

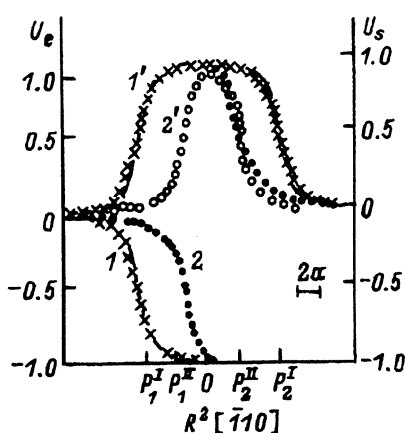


Рис. 4. Распределение винтовой (1, 2) и краевой (1', 2') компонент смещения краевой дислокации в иридии.

Винтовая компонента смещения дана в единицах $a\sqrt{6}/6$, а краевая — $a\sqrt{2}/2$.

дислокации мы выбрали относительные смещения атомов, принадлежащих третьему и пятому слоям, принадлежащих внутренней области кристаллита и лежащих соответственно выше и ниже плоскости скольжения ...

Анализ распределения смещения на площадке моделирования вблизи краевой и винтовой дислокаций показал, что в обоих случаях конфигурация ядра дислокации является плоской и максимальные смещения сосредоточены вблизи выбранной плоскости скольжения.

Результаты моделирования для распределения смещений вблизи плоскости скольжения дислокаций в направлении, перпендикулярном ее линии, представлены на рис. 3-6.

На рис. 3 показано распределение винтовой (кривые 1, 2) и краевой (кривые 1', 2') компонент смещения для винтовой дислокации в иридии. Точками показаны результаты компьютерных расчетов, а сплошной кривой результаты расчетов по теории упругости. Кривые 1 и 1' относятся к случаю, когда в качестве начальной конфигурации выбиралась расщепленная по теории упругости дислокация (в дальнейшем будем называть этот случай I). Кривые 2 и 2' соответствуют II случаю, когда в качестве начальной конфигурации выбиралась практически нерасщепленная дислокация. Точками P_1^I, P_2^I и P_1^{II}, P_2^{II} обозначены положения частичных дислокаций для I и II случаев соответственно.

Распределение винтовой и краевой компонент смещения для краевой дислокации для иридия показано на рис. 4 для I и II конфигураций соответственно. Аналогичные результаты для родия представлены для дислокаций винтовой (рис. 5) и краевой ориентаций (рис. 6). Величина расщепления винтовой и краевой дислокаций представлены в табл. 1. Из таблицы видно, что ширина расщепления для краевой и винтовой дислокаций для конфигурации II существенно уже (в 2 раза), чем для конфигурации I.

Сравнение полученных в результате расчетов смещений по плоскости скольжения дислокаций с рассчитанным по теории упругости по

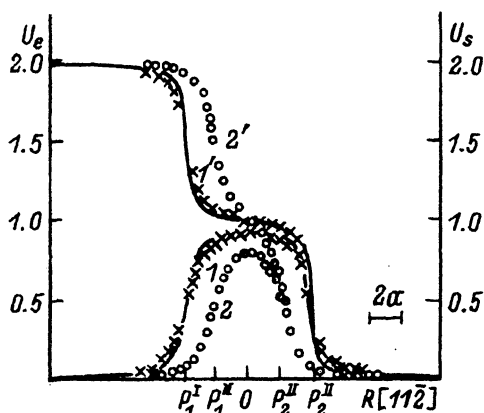


Рис. 5. Распределение винтовой (1, 2) и краевой (1', 2') компонент смещения винтовой дислокации в родии. Размерности те же, что и на рис. 3.

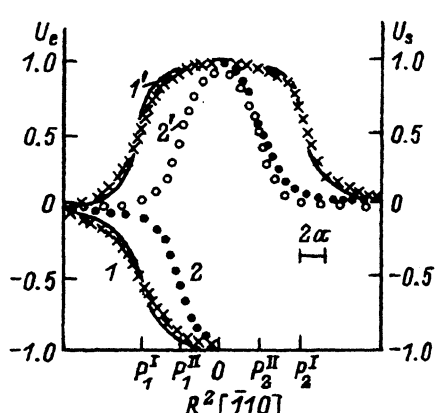


Рис. 6. Распределение винтовой (1, 2) и краевой (1', 2') компонент смещения краевой дислокации в родии. Размерности те же, что и на рис. 4.

Таблица 1. Величины расщепления для винтовой и краевой дислокаций в иридии и родии

Компонента	Ir ^I	Ir ^{II}	Rh ^I	Rh ^{II}
s	30.1	15.1	29.8	16.2
e	53.8	29.0	49.7	26.8

формуле (1) показало, что для иридия реализуется расщепление на частичные дислокации, соответствующие $x = 0.95$ в первом случае и 0.87 во втором случае для винтовой дислокации и $x = 1$ и 0.90 для краевой дислокации в первом и втором случаях соответственно.

Аналогичное сравнение для родия показало, что $x = 0.93$ в первом случае и 0.81 во втором случае для винтовой дислокации; $x = 1$ в первом случае и 0.96 во втором случае для краевой дислокации. Величина x уменьшается при увеличении энергии дефекта упаковки в ряду металлов медь, родий, иридий ($50, 87, 140$ мДж/м²), что согласуется с наблюдающейся в [13] тенденцией к образованию обобщенного дефекта упаковки.

Расчеты показали, что в том случае, когда начальное расщепление задается в соответствии с упругостными расчетами, величина релаксации достаточно мала. Во втором случае величина релаксации существенно больше, больше также отклонение от обычного расщепления на частичные дислокации (см. формулу (1)). Оценки показывают, что эффективная энергия нестабильного дефекта упаковки, получающегося при релаксации из стянутой конфигурации, и соответствующая такому расщеплению равны для иридия 280 и 160 мДж/м² для родия.

Ширина частичных дислокаций определялась для меди, иридия и родия для винтовой ω_s и краевой ω_e дислокаций. Ширина частичных дислокаций, оцениваемая как проекция отрезка касательной к кривой $U(\mathbf{R})$ в точке перегиба на ось \mathbf{R} [14], определялась для меди, иридия и родия. Во всех рассмотренных случаях $\omega_s \approx 2-2.2a$, а $\omega_e \approx 2.4-2.6a$. Однако отметим, что при удалении от ядра частичной дислокации смещения в меди спадают существенно медленнее значений для иридия и родия. Это может означать, что ядро частичной дислокации в меди является более размазанным, чем в иридии и родии. Если оценивать ширину частичной дислокации как область вблизи ядра, для которой смещения $U(\mathbf{R})$ превосходят заданную величину (например, $0.1a$), тогда ширина частичной дислокации в меди увеличивается в 2 раза, тогда как для иридия и родия эти оценки совпадают.

Известно [14], что величина напряжения Пайерлса увеличивается с уменьшением ширины ядра дислокации. Низкое значение σ_p для меди, характерное также для большинства ГЦК металлов, обусловлено достаточной величиной расщепления полной дислокации и широким ядром частичных дислокаций. Можно ожидать, что для существенно более узкого ядра частичных дислокаций для иридия и родия, полученных в настоящей работе, величина σ_p будет существенно выше.

Важным результатом настоящей работы является наличие двух конфигураций винтовой и краевой дислокаций, полученных для различных вариантов выбора начальной конфигурации. Этот результат не зависит от размера кристаллита, число атомов которого варьирова-

лось и достигало ≈ 6660 атомов. Отметим, что для меди в результате релаксации всегда получался один вариант расщепления независимо от выбора начальной конфигурации [11].

Более узкое ядро дислокации в иридии и родии (случай II) при релаксации из нерасщепленной конфигурации, отмеченное выше, может быть причиной более высокого напряжения Пайерлса для движения частичных дислокаций. Равновесное расстояние между частичными дислокациями в этом случае может определяться эффективной энергией дефекта упаковки $\gamma^{\text{эфф}} = \gamma + \sigma_{pb}$, увеличение значения которой обусловлено сопротивлением движению частичных дислокаций в рельефе Пайерлса. Можно предположить правомерность существования двух этих конфигураций, различающихся вектором Бюргерса частичных дислокаций и соответствующей им обобщенной энергией дефекта упаковки. В пользу этого может говорить более низкое значение энергии кристаллита с дислокацией, имеющей скорее узкое ядро, чем широкое. Можно ожидать, что напряжение Пайерлса σ_{p1} и σ_{p2} для движения двух конфигураций дислокаций также различаются.

Устойчивость полученных конфигураций, а также возможность их взаимных превращений в поле напряжений позволят сделать окончательный выбор в пользу той или иной конфигурации, такие исследования предполагается провести в дальнейшем.

Таким образом, ядро дислокации в иридии и родии оказалось плоским, что и объясняет экспериментальный факт сравнительно низкого значения предела текучести и близости отношения предела текучести к модулю сдвига для иридия и меди. Заметим, что в работе [2] в экспериментах при деформировании монокристаллов с ориентировкой вблизи [110] была обнаружена асимметрия предела текучести в зависимости от знака (растяжение, сжатие) деформирующего напряжения. Наличие такой асимметрии при некоторых ориентациях деформации монокристаллов попробуем связать с полученными в настоящей работе двумя конфигурациями ядра дислокации в иридии и родии и отмеченными выше различными значениями σ_{p1} и σ_{p2} .

В табл. 2 приведены значения факторов Шмида для одной из первичных систем скольжения для ориентировок [100], [111], [110] осей растяжения (сжатия) в вершинах стереографического треугольника и ориентировки [311] в центре стереографического треугольника. В табл. 2 приведены также факторы Шмида для частичных дислокаций, на которые расщепляются вектора Бюргерса дислокаций первичной системы скольжения.

Таблица 2. Факторы Шмида для первичной системы скольжения [101] ($\bar{1}\bar{1}1$)

ν	[100] (8) ¹	[111] (6)	[110] (4)	[311] (2)
1/2 101	-0.408	-0.272	-0.408	-0.445
1/6 211	-0.471	-0.151	-0.236	-0.386
1/6 112	-0.235	-0.314	-0.471	-0.386

¹ В скобках указано число систем скольжения с одинаковыми факторами Шмида.

При ориентировках в центре стереографического треугольника (ориентировка [311], табл. 2) факторы Шмида для частичных дислокаций совпадают. Это означает, что движение частичных дислокаций при [311] ориентировке начинается одновременно и не зависит от знака внешнего прикладываемого напряжения. При ориентации оси деформации в вершинах стереографического треугольника ситуация другая: фактор Шмида для одной из частичных дислокаций в два раза выше, чем для другой. Поэтому при возрастании деформирующего напряжения сначала начинает двигаться одна из частичных дислокаций, при этом начальная конфигурация изменяется, и только при более высоком значении напряжения начинают двигаться другая частичная дислокация и вся дислокация в целом.

Так как последовательности частичных дислокаций жестко определяются типом дислокации (вектором Бюргерса, осью, нормалью к плоскости скольжения [14]), то в зависимости от знака напряжения частичная дислокация с большим фактором Шмида будет двигаться первой, либо увеличивая, либо уменьшая ширину расщепления. При этом начальная конфигурация дислокации до момента движения ее как целого может измениться в зависимости от направления движения.

Если ширина расщепления увеличивается, то возможно превращение полной дислокации до начала ее движения как целого в конфигурацию типа I, если же она уменьшается, то в конфигурацию типа II. Тогда движение дислокации как целого в I случае начинается при напряжении σ_{p_1} , а во втором случае — при напряжении σ_{p_2} .

Так, при ориентировке [100] первой начинается движение дислокации $1/6 [2\bar{1}1]$ (табл. 2), что в случае растяжения приводит к узкой конфигурации ядра дислокации, а в случае сжатия к широкой. Для ориентировок [111] и [110] ситуация обратная. Движение дислокации $1/6 [112]$ приводит к узкой конфигурации ядра дислокации в случае сжатия и к широкой в случае растяжения. Наблюдаемое экспериментально более высокое значение предела текучести для [110] ориентировки монокристалла в иридии при сжатии [2] может быть связано с более высоким напряжением σ_{p_2} для движения расщепленной дислокации в поле внешнего напряжения.

Таким образом, ядро дислокации в иридии и родии оказалось плоским, что объясняет тот факт, что монокристаллы этих металлов деформируются до довольно высоких степеней (77% деформации для иридия). Рассуждая о возможных причинах хрупкости следует, по-видимому, отбросить некомпланарную структуру ядра дислокаций, ковалентный характер межатомных связей, поскольку, как было показано в нашей работе [8], межатомные связи не являются направленными, так как вклад трехчастичных взаимодействий оказался мал. Хрупкое разрушение, наблюдаемое при больших пластических деформациях, может быть связано с образованием зародышей трещин, являющихся результатом пересечения дислокаций нескольких систем скольжения, либо с появлением модулированных структур, обусловленных низким значением энергий дефектов упаковки и обнаруженных экспериментально в ряде других ГЦК металлов [15].

Список литературы

- [1] *Douglass R.W., Krier C.A., Jaffe R.I.* // Rept. to Office of Naval Research. Battelle Memorial Institute, 1961.
 - [2] *Brooks C.A., Greenwood J.H., Routbort J.L.* // J. Inst. Met. 1970. Vol. 98. P. 27.
 - [3] *Gandhi C., Ashby M.F.* // Scr. Met. 1979. Vol. 13. N 5. P. 271.
 - [4] *Hieber H., Mordiki B.L., Haasen P.* // Platinum Met. Rev. 1964. Vol. 8. N 3. P. 102.
 - [5] *Reid C.N., Routbort J.L.* // Met. Trans. 1972. Vol. 3. P. 2257.
 - [6] *Rice J., Thompson R.* // Phil Mag. A. 1974. Vol. 29. P. 73.
 - [7] *Ivanov A.S., Katsnelson M.I., Mikhin A.G. et al.* // Phil Mag. 1993. In press.
 - [8] *Greenberg B.A., Katskelson M.I., Koreshkov V.G. et al.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1990. Vol. 158. P. 441.
 - [9] *Simmons G., Wang H.* // Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregated Properties. Cambridge (Massachusetts): MIT Press, 1971.
 - [10] *Архипов Н.К., Клоцман С.М., Поликарпова М.Н. и др.* // ФММ. 1986. Т. 62. С. 1181.
 - [11] *Яковенкова Л.И., Карькина Л.Е., Подчиненова Г.Л.* // ФММ. 1985. Т. 59. Вып. 5. С. 889.
 - [12] *Vitek V., Kroupa F.* // Phil Mag. 1969. Vol. 19. N 158. P. 265.
 - [13] *Vitek V.* // Crystal Lattice Defects. 1974. Vol. 5. P. 1.
 - [14] *Хирт Дж., Лоте И.* // Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
 - [15] *Remy L.* // Met. Trans. A. 1981. Vol. 12A. P. 387.
-