

Особенности эволюции дефектной структуры при фазовых превращениях в системе Pd–H

© А.А. Кацнельсон, М.А. Князева, А.И. Олемской*, Г.П. Ревкевич

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119899 Москва, Россия

*Сумский государственный университет,
244000 Сумы, Россия

(Поступила в Редакцию 4 января 1997 г.)

Представлена картина эволюции дефектной структуры в системе Pd–H при фазовых превращениях, базирующаяся на рентгенографических данных. Показано, что возникающие при фазовых превращениях в α -фазе хаотические дислокации после достижения критической их плотности выстраиваются в дислокационные стенки. Следствием этого является возникновение ячеистой дислокационной субструктуры в α -фазе. После формирования ячеистой субструктуры в α -фазе возникающие в процессе фазовых превращений хаотические дислокации переползают в гидридную фазу, ограничивая тем самым развитие дефектной структуры в α -фазе. Дальнейший приток дислокаций в β -фазу обеспечивает далее последовательное развитие дефектной структуры (от ячеистой до блочной дислокационной субструктуры). Лишь после этого становится возможным завершение развития дефектной структуры в α -фазе: в ней формируется блочная субструктура. Обсуждена природа обнаруженного явления.

Палладий и его сплавы обладают уникальной способностью растворять водород. Известны две модификации твердых растворов водорода в палладии: α - и β -фазы. Атомы палладия в решетке обеих фаз образуют ГЦК-структуру, атомы водорода распределяются преимущественно по октаэдрам [1,2]. Разница в удельных объемах решеток α - и β -фаз составляет 10%, и поэтому процессы $\alpha \leftrightarrow \beta$ сопровождаются генерацией дефектов. Возникающие дефекты взаимодействуют между собой, а также с атомами палладия (и других металлов, если исследуются сплавы) и легкоподвижными атомами водорода. В результате возникает разветвленная дефектная структура, эволюция которой не может быть тождественной эволюции структуры при пластической деформации деформируемых кристаллов, но должна включать ее характерные черты.

Современные представления об этой эволюции изложены, например, в [3–6]. Долгое время процесс пластической деформации связывали с эволюцией разнообразных дефектов, которые остаются самостоятельными структурными образованиями. При этом эволюция системы дефектов имеет вид цепочки дебаевских процессов термофлуктуационного преодоления барьеров между минимумами термодинамического потенциала с разными временами релаксации. Эта картина в действительности отвечает лишь малым степеням пластической деформации. В реализующихся на практике случаях плотность дефектов настолько велика, что в их поведении проявляются коллективные эффекты [4,7–9]. Это означает, что в ансамбле дефектов устанавливается когерентная связь между составляющими ансамбля, и установление такой связи в ансамбле дефектов одного уровня приводит к автолокализованному образованию структурных элементов более высокого уровня [3,5,6]. Простые примеры этого явления: кластеризация вакансий приводит к образованию дислокационных петель [9,10], скопление дислокаций трансформируются в дислокационные

стенки, границы разориентации [4,8] и т.д. Подобные особенности коллективного поведения дефектов связаны с сильной неравновесностью ансамбля дефектов. В результате возникает иерархическая система дефектов, а поскольку между разными структурными уровнями существует определенная связь, эту систему правильнее называть иерархически соподчиненной [11,12]. Появление подобной системы дефектов с неизбежностью приводит к тому, что распределение термодинамического потенциала в конфигурационном пространстве имеет фрактальную структуру [11,13].

За исключением простых случаев, эмпирические ситуации описываются именно изложенными выше представлениями. На этой же основе следует рассматривать эволюцию дефектной структуры, обусловленную не только механическим воздействием, но и фазовыми превращениями или химическими эффектами. Естественно, это относится и к системе металл–водород. В ранних работах [14–17], посвященных исследованию субструктуры в системе Pd–H, авторы ограничивались констатацией факта значительного роста плотности хаотических дефектов в процессе фазовых превращений. В последующих работах [18–21] было показано, что накопление хаотических дефектов приводит к образованию их комплексов: дислокационных стенок, дислокационных петель малого радиуса и т.д., т.е. формируется иерархическая дефектная структура. Однако анализ имевшихся экспериментальных данных далеко не полностью учитывал современные представления об эволюции дефектной структуры в деформируемых кристаллах. Поэтому полученные прежде результаты не дают полной картины эволюции дефектного ансамбля палладия, насыщенного водородом.

Предлагаемая работа посвящена выяснению закономерностей развития иерархической дефектной структуры в двухфазной системе Pd–H.

1. Образцы и методика эксперимента

В качестве объектов исследования были выбраны поликристаллические образцы палладия, вырезанные из слитка (№ 1–3). После изготовления два массивных образца (№ 1, 3) отжигались в вакуумной печи при температуре 700°C в течение 2 h, затем остывали вместе с печью. Состояние после термообработки будем называть "отожженным" (образцы № 1, 3), без отжига — "деформированным" (№ 2).

Образцы насыщались водородом электрохимически (электродлит — 4% водный раствор NaF, анод — платиновая пластина), после этого они хранились на воздухе при комнатной температуре. Образец № 3 прошел девять циклов "насыщение–дегазация".

Исследования проводились рентгенографическими методами на дифрактометре "ДРОН-УМ1" в режиме автоматической записи с использованием монохроматического $\text{Cu-K}\alpha$ -излучения. Интегральные интенсивности и ширины дифракционных максимумов измерялись непосредственно после насыщения и в процессе дегазации.

Методом аппроксимаций [22] определялись параметры субструктуры: размер областей когерентного рассеяния (ОКР) D и величина микродеформаций в них ε . Размер ОКР D соответствует расстоянию между дислокационными стенками [23]. Значения D , которые могут быть найдены из размытия рентгеновских линий, составляют $(2-8) \cdot 10^{-6}$ см, а из коэффициента первичной экстинкции — $(2-3) \cdot 10^{-5}$ см.

Величина микродеформаций ε связана с плотностью хаотически распределенных дислокаций, их скоплений, дислокационных петель большого радиуса [23]. Практически размытие линий обнаруживается, если плотность хаотически распределенных дислокаций превышает $5 \cdot 10^9$ см. Точность определения D и ε составляет 10–15%.

Сопоставление интенсивностей для первого и второго порядков отражения позволяло обнаруживать наличие дефектов I класса [23] и экстинкции [24]. При этом заметное ослабление дифракционных максимумов возможно лишь после коагуляции вакансий в микропустоты или образования петель малого радиуса. Поскольку микропустоты неустойчивы и стремятся к схлопыванию, образуя дислокационные петли [25], наблюдаемое ослабление интенсивностей в работе, скорее всего, связано с дислокационными петлями малого радиуса.

2. Результаты эксперимента

Экспериментальные результаты представлены для образцов (см. также [18–21]), общий анализ данных для которых позволяет наиболее полно представить картину эволюции дефектной структуры в системе Pd–H при протекании фазовых превращений. Данные приводятся в последовательности усложнения дефектной структуры.

Образцы № 1 (отожженный) и № 2 (деформированный) насыщались в течение 15 min при плотности тока 40 mA/cm². На рис. 1 указаны изменения размера ОКР D , микродеформаций ε и отношения интенсивностей $I(200)/I(400)$ в процессе дегазации для образца № 1 (a) и 2 (b). В отожженном состоянии размер ОКР равен $D = 2 \cdot 10^{-5}$ см, микродеформации пренебрежимо малы. Насыщение образца приводит к появлению заметных микродеформаций в ОКР α -фазы ($\varepsilon = 3 \cdot 10^{-3}$). Образованные в результате насыщения области β -фазы успевают дорасти до размеров исходных ОКР, в них возникают микродеформации $\varepsilon = 2.5 \cdot 10^{-3}$. В первые 25 h объемное содержание β -фазы уменьшается от 60 до 2%. Это приводит к существенным изменениям субструктуры в α -фазе: микродеформации возрастают до величины $4 \cdot 10^{-3}$, размер ОКР уменьшается в ~ 4 раза, а отношение $I(200)/I(400)$ возрастает на 20% и достигает значения 1.1. Изложенные факты позволяют представить развитие дефектной структуры данного образца в следующем виде. В результате протекания фазовых превращений плотность хаотически распределенных дефектов в α -фазе возрастает настолько, что энергетически выгоднее их преобразование в соответствующие комплексы: вакансии объединяются в призматические петли малого радиуса, за счет чего растет отношение $I(200)/I(400)$, дислокации выстраиваются в стенки, что соответствует размельчению ОКР. Это означает, что дефектная структура в α -фазе приобретает иерархический характер. Возможно, что величина $\varepsilon_\alpha = 4 \cdot 10^{-3}$ (плотность дислокаций $\rho \sim 8 \cdot 10^{11}$ см⁻³), наблюдаемая как максимальная, в том числе и в [20], соответствует предельным (критическим) значениям, после достижения которых происходит отток хаотических дислокаций в комплексы.

Для образца № 2 в исходном состоянии микродеформации составляют $2 \cdot 10^{-3}$, размер ОКР равен $1.5 \cdot 10^{-5}$ см, отношение $I(200)/I(400) \sim 0.95$. В результате насыщения концентрация β -фазы достигает 80%, при этом размер ОКР α -фазы уменьшается до $4 \cdot 10^{-6}$ см, величина микродеформаций возрастает приблизительно в 1.5 раза, $I(200)/I(400)$ изменяется незначительно (0.9). ОКР β -фазы увеличивается до размера исходной α -фазы, в них возникают микродеформации $\varepsilon = 2.7 \cdot 10^{-3}$.

В процессе дегазации деформированного образца параметры субструктуры (D и ε) α -фазы практически не меняются. Этот факт, а также наблюдаемое в результате насыщения размельчение ОКР могут означать, что уже в процессе $\alpha \rightarrow \beta$ -превращения плотность хаотических дислокаций в α -фазе возрастает настолько, что начинается формирование дислокационных стенок. Образование новых дислокационных стенок в отожженном образце наблюдалось только в процессе последующей дегазации, что обусловлено, по-видимому, более низкой плотностью дефектов в исходном состоянии.

Данные, приведенные на рис. 1, b, показывают, что в процессе дегазации деформированного образца № 2 значительная перестройка дефектной структуры происходит только в β -фазе. В первые 25 h размер ОКР β -фазы

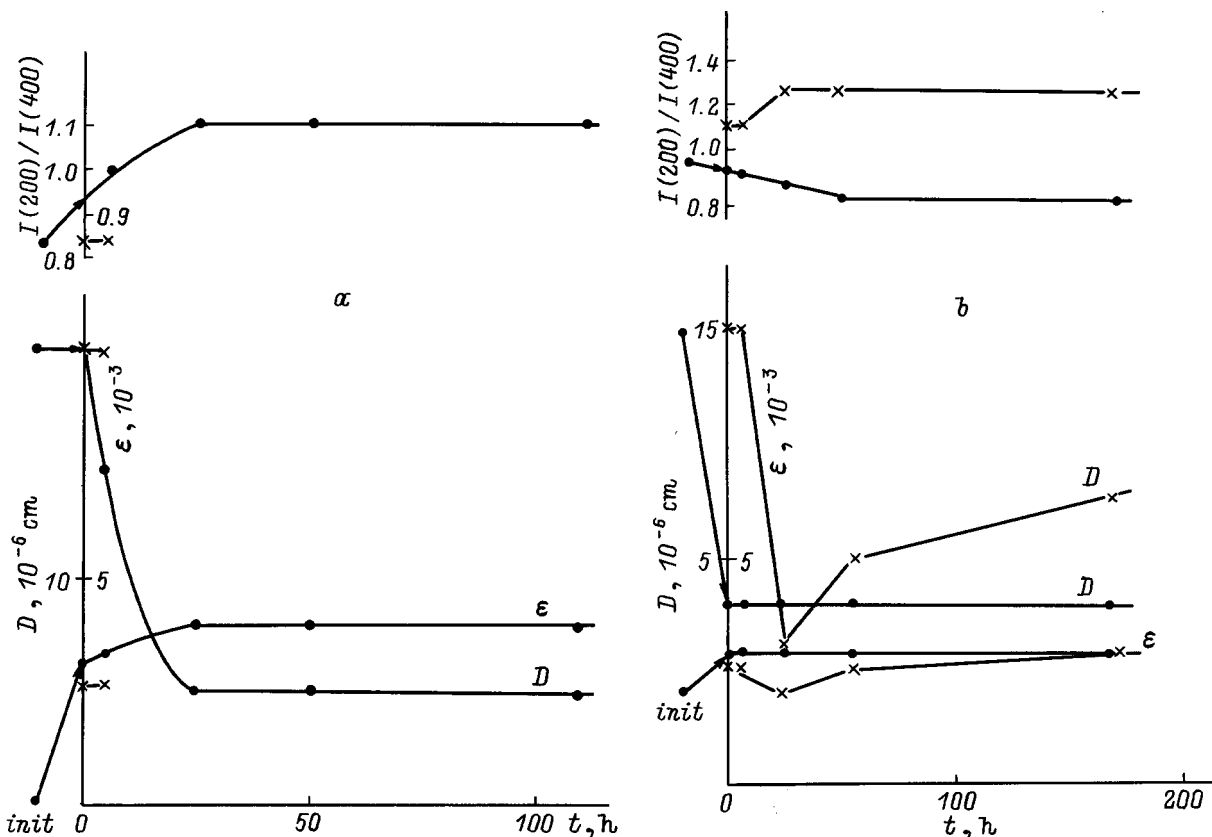


Рис. 1. Зависимость параметров субструктуры (D и ϵ) и отношения интенсивностей $I(200)/I(400)$ от времени вылеживания t . a — для образца № 1, b — для образца № 2. Точками обозначены данные для α -фазы, крестиками — для β -фазы.

уменьшается в 5 раз, отношение $I(200)/I(400)$ увеличивается на 25% и достигает значения 1.25. Интересно изменение микродеформаций в β -фазе при дегазации: ϵ_β сначала уменьшается, после 25 h растет, достигая исходного значения к 170 h вылеживания. Размельчение ОКР и рост отношения интенсивностей свидетельствуют об образовании в β -фазе комплексов — дислокационных стенок и дислокационных петель малого радиуса. В дальнейшем характер эволюции дефектной структуры β -фазы совершенно меняется: размер ОКР возрастает, значения микродеформаций и отношения $I(200)/I(400)$ остаются практически неизменными.

Образец № 3 подвергался девятикратному циклированию (плотность тока и время насыщения изменялись от 40 mA/cm² и 15 min до 60 mA/cm² и 120 min). На рис. 2, a представлено изменение параметров субструктуры фаз в зависимости от содержания β -фазы в циклах. За исключением первого цикла, содержание β -фазы в последующих циклах не менялось. Изначально размер ОКР (100) составлял $3 \cdot 10^{-5}$ см, микродеформации были очень малы. После первого цикла размер ОКР уменьшился до $5 \cdot 10^{-6}$ см, а микродеформации выросли до $2.2 \cdot 10^{-3}$, в последующих циклах параметры D и ϵ для α -фазы не менялись, росло лишь отношение $I(200)/I(400)$, достигая величины 1.4 к последнему циклу. По мере накопления β -фазы в последних циклах

наблюдается измельчение ОКР в гидридной фазе. Отношение интенсивностей дифракционных максимумов разных порядков отражения возрастает на ~30%, но не превышает единицы.

Рассмотрим эволюцию дефектной структуры в процессе дегазации после заключительного насыщения (рис. 2, b). В первые $10 \cdot 10^3$ h наблюдается рост микродеформаций в α -фазе в 1.8 раза, а в β -фазе — всего на 25%; при дальнейшей дегазации ϵ_α в пределах ошибки остается практически неизменной, ϵ_β постепенно уменьшается. Дислокационные стенки, образовавшиеся в последних циклах в β -фазе, при дегазации постепенно исчезают (растет D). В α -фазе процесс укрупнения ОКР идет с меньшей скоростью. Рост ОКР α -фазе наиболее заметен после $50 \cdot 10^3$ h дегазации, в то время как размер ОКР β -фазы остается неизменным. Таким образом, при дегазации образца № 3 процесс укрупнения ОКР идет наиболее интенсивно сначала в β -фазе, затем в α -фазе.

Изложенные экспериментальные данные позволяют представить изменения субструктуры фаз в системе Pd-H при протекании фазовых превращений. В процессе насыщения и последующей дегазации возрастает плотность хаотических дислокаций в α -фазе. При достижении критической величины они выстраиваются в малоугловые стенки. В результате размер ОКР уменьшается, микродеформации спадают. Далее наблюдается

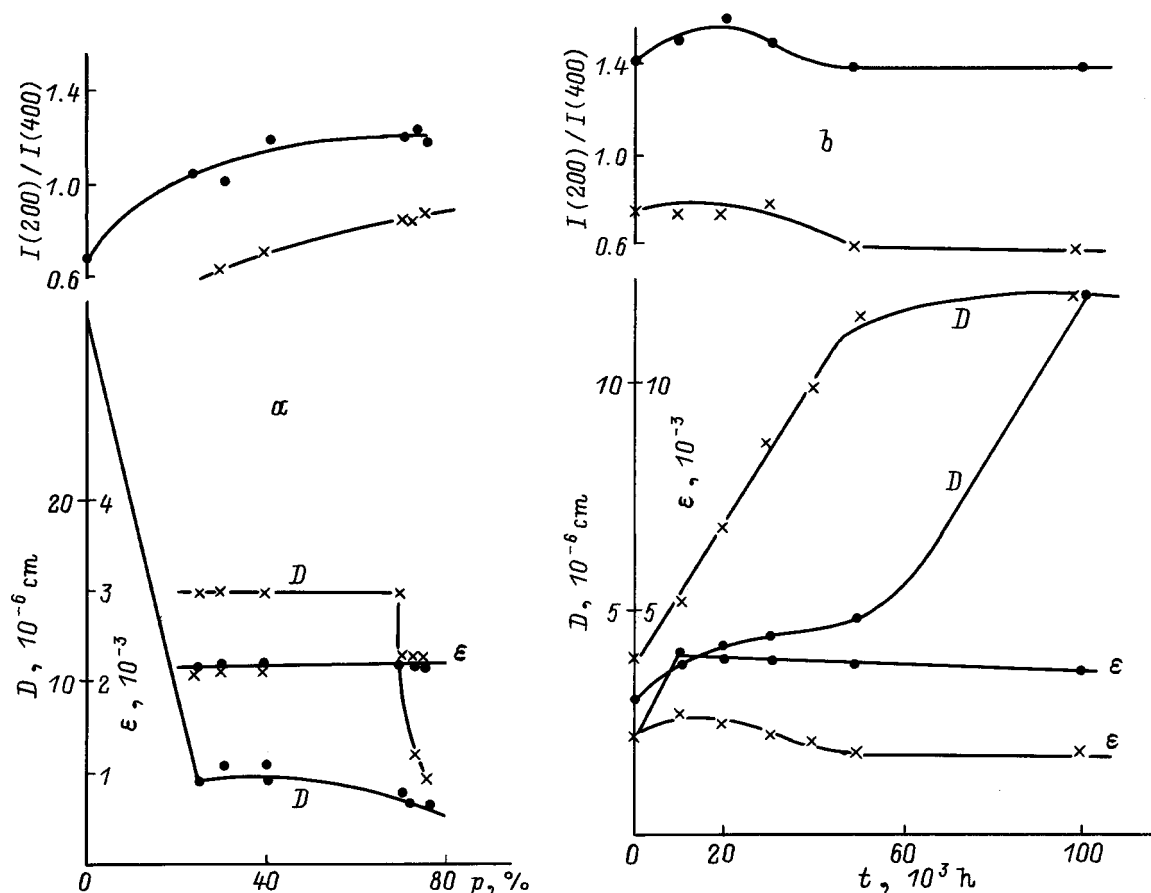


Рис. 2. Зависимость параметров субструктуры (D и ϵ) и отношения интенсивностей $I(200)/I(400)$ от содержания β -фазы $p(\%)$ в циклах (a) и от времени вылеживания t после последнего насыщения водородом (b) для образца № 3. Точками обозначены данные для α -фазы, крестиками — для β -фазы.

размельчение ОКР β -фазы. В процессе последующей дегазации происходит укрупнение ОКР β -фазы до размеров ОКР, возникших в результате насыщения. После роста ОКР β -фазы процесс укрупнения ОКР и снятия микродеформаций наблюдается в α -фазе. Обращает на себя внимание тот факт, что сначала при дегазации происходит измельчение ОКР, после чего начинается процесс укрупнения их размеров.

3. Обсуждение результатов

Проанализируем экспериментальные данные, используя разработанные в [3–8] представления о пластической деформации в кристаллах. Классификация структурных уровней деформации рассматривалась и предлагалась рядом авторов [3–6]. Представленный в [3,6] спектр уровней носит ориентировочный характер и зависит от вида физического воздействия на кристалл. Кроме того, масштабы дефектных образований могут отличаться в различных условиях. Тем не менее многообразие структурных уровней по масштабу можно объединить в четыре больших класса: микроуровень (до 100 nm),

мезоуровень (0.1–20 μ m), уровень зерна (10–200 μ m), макроуровень (200 μ m). Внутри каждого указанного диапазона авторы [6] вводят более мелкую градацию, выделяя наиболее значимые структурные уровни.

Особое внимание уделяется изучению такого структурного уровня, как дислокационный ансамбль, формирование и развитие которого оказывает определяющее влияние на изменение многих механических характеристик. В [26–28] предложена подробная классификация дислокационных субструктур на уровне дислокационного ансамбля; определен набор параметров, характеризующих каждую из дислокационных субструктур. Эта классификация основана на экспериментальных данных, полученных при помощи электронной микроскопии, поскольку этот метод позволяет надежно идентифицировать типы структурных элементов и проследить за их развитием. Однако настоящая работа посвящена изучению системы Pd–H, важнейшей особенностью которой является большая подвижность водорода, в том числе и интенсивная дегазация образцов в процессе исследования. Это может существенно повлиять на кинетику $\beta \rightarrow \alpha$ -превращения и на развитие субструктуры. При этом для исследований используются массивные образ-

цы. Учитывая указанные выше обстоятельства, следует считать, что применение электронной микроскопии в рассматриваемом случае может привести к данным, неадекватно отражающим реальные процессы в исследуемых образцах.

В связи с этим в настоящей работе используется метод рентгеновской дифракции, который, безусловно, нельзя считать идеальным, поскольку он, являясь интегральным, не позволяет выявить каждый из типов присутствующих в образце дефектов. Однако с его помощью оказалось возможным фиксировать структурные изменения в некотором объеме поликристалла (глубина проникновения рентгеновских лучей (Cu-K_α -излучение) в образец Pd составляет $\sim 5 \cdot 10^{-4}$ см). Указанный метод позволяет регистрировать не только ряд структурных уровней деформации, но и концентрацию каждой из фаз. В результате становится возможным проследить за трансформацией структурных уровней непосредственно в процессе фазовых превращений.

Использованный метод позволяет описывать наиболее полно именно изменения дислокационной субструктуры. Соответственно основное внимание здесь будет уделено обсуждению эволюции дислокационной субструктуры. Развитие дефектной структуры в двухфазной системе Pd–H происходит в пределах ОКР α - и β -фаз, размеры которых меньше размеров зерен. Отсюда целесообразно рассмотреть дислокационные субструктуры, формирование которых происходит в пределах зерна.

В отожженных образцах размеры ОКР превышают $20 \cdot 10^{-6}$ см. При возмущающем воздействии водорода, особенно после возникновения двухфазной системы, содержащей α - и β -фазы, образуется большое количество дислокаций, которые вначале распределены, скорее всего, хаотически. После того как плотность образующихся дислокаций достигает критической, дислокации выстраиваются в малоугловые стенки, что приводит к разбиению исходных ОКР на более мелкие. Возникающие ОКР такого размера будем называть ячейками субструктуры, а дислокационную субструктуру — ячеистой. Последующее наблюдаемое преобразование дефектной структуры заключается в появлении более крупных по размеру ОКР, близких к исходным. Будем называть их блоками. Их образование обусловлено, скорее всего, уходом стенок и дислокаций в границы. В результате формируется так называемая блочная субструктура. Угол разориентации блоков возрастает за счет увеличения плотности дислокаций в них. Согласно [25–27], каждый новый тип субструктуры возникает только после того, как предшествующий перестает эволюционировать и играть активную роль в пластической деформации.

Образование ячеистой субструктуры в α -фазе можно определить как первый (I) этап развития иерархической дефектной структуры в системе Pd–H. Реализация указанного этапа в различных образцах происходит в разные моменты времени в зависимости от их исходного состояния и режимов насыщения. Так, в деформированном образце этот этап достигается уже в результате

насыщения, тогда как для отожженного он длится и во время дегазации.

После формирования ячеек субструктуры в α -фазе перестройка дефектной структуры протекает по той же схеме уже в β -фазе. Образование ячеистой субструктуры в β -фазе следует определить как второй (II) этап развития. Этот этап наблюдается при дегазации только в деформированном массивном образце, поскольку формирование субструктуры α -фазы завершилось уже к началу дегазации. Для циклированного образца указанная перестройка дефектной структуры β -фазы наблюдается в последних циклах насыщения. К началу процесса длительной дегазации в этом образце указанные этапы (I и II) можно считать завершенными.

Далее при дегазации происходит образование более крупных блоков в β -фазе за счет оттока дислокаций и стенок, как мы предполагаем, в границы. Размер блоков в β -фазе ограничен размером образовавшихся в процессе насыщения ОКР β -фазы. Формирование блочной дислокационной субструктуры в β -фазе следует определить как третий (III) этап развития иерархической дефектной структуры в исследуемой системе. Следующий этап (IV), наблюдаемый в рассматриваемом эксперименте как последний, связан с дальнейшей перестройкой дефектной структуры в α -фазе. Границы образованных на начальном этапе в α -фазе ячеек исчезают, вследствие чего формируются более крупные блоки, размеры которых сравнимы с размерами исходных ОКР. Практически все перечисленные этапы наблюдались для циклированного образца.

Очень интересен и необычен сам факт немонотонного характера протекания процессов в β -фазе (на II–III этапах) и α -фазе (на I–IV этапах): сначала D уменьшается, а затем растет. Немонотонность поведения D , безусловно, связана с тем, что рассматриваемая система представляет собой неравновесную открытую систему. Подобная зависимость некоторых характеристик дефектной структуры в водородсодержащих системах на основе палладия нами наблюдалась уже в [29–32], однако в данной работе нам удалось перейти от дифракционных характеристик дефектной структуры к собственно структурным.

Отметим, что каждый из выделенных этапов развития определяется как типом субструктуры, так и фазой, в которой эта субструктура реализуется. Поэтому смена этапов не сводится просто к смене субструктур в деформируемом кристалле, как было в [27]. Например, на I и II этапах субструктура одна и на же — ячеистая, но на II этапе она образуется в β -фазе. Как видно из эксперимента, эта субструктура возникает только тогда, когда формирование ячеистой субструктуры в α -фазе (I этап) в основном завершено. Поэтому мы выделяем II этап как самостоятельный, который начинается лишь после прохождения предыдущего этапа.

Проведенные данные указывают на весьма нетривиальную картину эволюции дефектной структуры в двухфазном состоянии Pd–H. Первоначальное образование хаотически распределенных дислокаций в α -фазе не

вызывает вопросов: оно связано с дилатацией решетки в ходе $\alpha \leftrightarrow \beta$ -превращений. Последующее их выстраивание в малоугловые стенки обеспечивается снижением энергии дислокационной структуры. Однако другие стороны представленной картины требуют объяснения. Прежде всего не ясно, почему на первом этапе развитие дефектной структуры в α -фазе ограничивается образованием ячеистой субструктуры. Второй вопрос касается причины появления на втором этапе хаотических дислокаций в β -фазе: они могут как перетекать через межфазную границу из α -фазы, так и зарождаться в самой β -фазе. И третий вопрос: почему на третьем этапе в β -фазе в отличие от α -фазы развитие дефектной структуры не ограничивается формированием ячеистой субструктуры, а продолжается дальше, в результате чего образуется блочная субструктура. Ответим на эти вопросы, основываясь на соображениях энергетической выгоды различных структур.

Основой предлагаемой картины является то обстоятельство, что энергия β -фазы выше ее значения для α -фазы на величину упругой энергии $\alpha \rightarrow \beta$ -превращения $E_c \sim \mu \delta^2$, где $\delta \sim 3 \cdot 10^{-2}$ — дилатация превращения, μ — модуль сдвига. Образование гидридной фазы сопровождается зарождением структурных дефектов (вакансий и хаотических дислокаций) прежде всего в α -фазе [14,18,20]. Энергия, связанная с хаотическими дислокациями, определяется соотношением $E_d \sim \mu b^2 \rho$ (μb^2 — энергия дислокации на единицу длины, ρ — плотность дислокаций) и при критической плотности дислокаций $\rho_{cr} \sim 8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ее величина достигает значения $\sim 0.6 \cdot 10^{-3} \mu$. Вследствие энергетической выгоды процесса собирания хаотических дислокаций в стенки именно этот процесс начинает идти после достижения критической плотности дислокаций. Эксперимент показывает, что число стенок (D) и хаотических дислокаций в ячейках (ε) остается практически неизменным. Поскольку процесс $\beta \rightarrow \alpha$ продолжается, а плотность хаотических дислокаций в ячейках не меняется, можно предположить, что возникающие хаотические дислокации могут накапливаться у границ областей (в пределах которых образуются ячейки субструктуры), которые разделяют две фазы. Практически одновременно с появлением границ ячеек образуются и дислокационные петли малого радиуса, что приводит к повышению энергии дефектной подсистемы.

Активный процесс дефектообразования в α -фазе приводит к тому, что по завершении I этапа энергия дефектной структуры E_d становится близкой к E_c . Вследствие этого хаотические дислокации могут преодолевать барьер E_e и начинают перетекать из α - в β -фазу. Не исключено, что это относится в первую очередь к приграничным дислокациям. Дальнейший приток дислокаций в результате $\beta \rightarrow \alpha$ -превращения обеспечивает этот процесс переползания из α - в β -фазу.

В пользу выдвинутого предположения перетекания дислокаций из α - в β -фазу свидетельствуют следующие

экспериментальные факты. Независимо от условий насыщения в образцах № 1–4 в [20] и № 1 и 3 в данной работе величина микродеформаций в β -фазе после наводороживания практически одна и та же $((2.2–2.5) \cdot 10^{-3})$ и остается неизменной при последующей дегазации, т.е. плотность дислокаций, образующихся в β -фазе непосредственно в результате насыщения, одинакова для всех случаев. И она возрастает тогда, когда в α -фазе завершается первый этап развития иерархической дефектной структуры — образуется ячеистая субструктура. Таким образом, рост плотности дислокаций в гидридной фазе обеспечивается притоком дислокаций из α -фазы. Это наблюдается для циклированного литого образца № 3 (рис. 2, б). Видно, что в начале дегазации рост ε_α опережает рост ε_β , т.е. хаотические дислокации при $\beta \rightarrow \alpha$ -превращении образуются преимущественно в α -фазе, а после достижения критических ε_α переходят в β -фазу.

Из приведенных рассуждений становится очевидным, что дислокации, образовавшиеся в α -фазе, перетекают в β -фазу, не обеспечивая дальнейшего развития иерархической дефектной структуры в объеме первой. Когда одиночные дислокации начинают перетекать из α - в β -фазу, то они приобретают дополнительную энергию $\sim E_e$ и попадают не в такую дефектную решетку, как в α -фазе, обладая, таким образом, высокой подвижностью, и выстраиваются в малоугловые стенки. За счет этого снижается энергия дефектной структуры. По мере протекания $\beta \rightarrow \alpha$ -превращения приток хаотических дислокаций в β -фазу продолжается в результате их переползания из α -фазы. Ячеистая субструктура становится неустойчивой. Дальнейшее снижение энергии дефектной структуры может происходить за счет оттока стенок и дислокаций в границы блоков. При этом в β -фазе образуются сравнительно малодефектные блоки. Итак, переток дислокаций из α - в β -фазу обеспечивает последовательное развитие дефектной структуры в гидридной фазе, в процессе которого образуется дислокационная субструктура, обладающая наименьшей энергией. Только после этого появляется возможность для окончательного выстраивания дефектов иерархической структуры α -фазы: на IV этапе формируется блочная субструктура. Именно такой процесс наблюдался в многократно циклированном образце № 3.

Своеобразие представленной картины эволюции дефектной структуры, безусловно, связано с тем, что система Pd–H относится к неравновесным открытым системам, фазовые превращения в которых могут рассматриваться как неравновесные фазовые переходы, а промежуточные дефектные субструктуры — как диссипативные структуры.

Данная работа частично финансировалась по грантам № 96-02-17263 Российского фонда фундаментальных исследований и № 20-96 программы "Университеты России".

Список литературы

- [1] Водород в металлах / Под ред. Г.И. Алефельда, И. Фелькля. М. (1981). Т. 1. 415 с.
- [2] П.В. Гельд, Р.А. Рябов, Е.С. Кодес. Водород и физические свойства металлов и сплавов. М. (1985). 231 с.
- [3] В.Е. Панин, В.А. Лихачев, Ю.В. Гриняев. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск (1985). 226 с.
- [4] В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М. (1986). 223 с.
- [5] В.Е. Панин, Т.Ф. Елсукова. В сб.: Синергетика и усталостное разрушение металлов. М. (1989). С. 113.
- [6] В.Е. Панин и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушение. Новосибирск (1990). 254 с.
- [7] В.А. Лихачев, А.В. Волков, В.Е. Шудегов. Континуальная теория дефектов. Л. (1986). 227 с.
- [8] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Л. (1986). 226 с.
- [9] ван Бюррен. Дефекты в кристаллах. М. (1960). 584 с.
- [10] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. М. (1972). 598 с.
- [11] А.И. Олемской, И.А. Скляр. УФН **162**, 6, 29 (1992).
- [12] Т.Ф. Елсукова, В.Е. Панин. Изв. АН СССР. Металлы, 2, 73 (1992).
- [13] В.В. Mandelbrot. The Fractal Geometry of Nature. San Francisco (1982). 468 p.
- [14] Н.С. Jamieson, G.C. Weatherly, F.D. Manchester. J. Less-Comm. Met. **50**, 1, 85 (1976).
- [15] В.А. Гольцов, В.А. Кириллов, В.С. Железный. ДАН СССР **259**, 2, 355 (1981).
- [16] В.А. Гольцов, Б.А. Лобанов. ДАН СССР **283**, 3, 598 (1985).
- [17] Г.П. Ревкевич, С.В. Свешников. Тез. докл. IV Всесоюз. семинара "Водород в металлах". М. (1984). Ч. 2. С. 199.
- [18] Г.П. Ревкевич, А.И. Олемской, А.А. Кацнельсон, В.М. Христов. Металлофизика **11**, 3, 57 (1989).
- [19] Г.П. Ревкевич, М.А. Князева, А.И. Олемской, А.А. Кацнельсон. Металлофизика **12**, 3, 71 (1990).
- [20] Г.П. Ревкевич, М.А. Князева, А.И. Олемской, А.А. Кацнельсон. ФММ, 9, 43 (1992).
- [21] Г.П. Ревкевич, А.И. Олемской, А.А. Кацнельсон, М.А. Князева. ФММ **79**, 2, 87 (1995).
- [22] В.И. Иверонова, Г.П. Ревкевич. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М. (1972). 246 с.
- [23] М.А. Кривоглаз. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев (1983). 407 с.
- [24] Р.Д. Джеймс. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М. (1950). 572 с.
- [25] Ж. Фридель. Дислокации. М. (1967). 643 с.
- [26] Н.А. Конева, Э.В. Козлов. Изв. вузов. Физика, 8, 3 (1982).
- [27] Н.А. Конева, Э.В. Козлов. Изв. вузов. Физика, 2, 89 (1990).
- [28] Н.А. Конева, Э.В. Козлов, Л.И. Тришкина. Металлофизика **13**, 10, 49 (1991).
- [29] А.А. Кацнельсон, И.В. Сухорукова, Г.П. Ревкевич. Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия **35**, 2, 64 (1994).
- [30] А.А. Кацнельсон, И.В. Сухорукова, А.И. Олемской, Г.П. Ревкевич. Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия **35**, 3, 94 (1994).
- [31] А.А. Кацнельсон, А.И. Олемской, И.В. Сухорукова, Г.П. Ревкевич. УФН **165**, 3, 331 (1995).
- [32] А.А. Кацнельсон, В.М. Авдюхина, Н.С. Колесова, Г.П. Ревкевич. Поверхность, 7, 62 (1996).