

05

Расчет энергетического профиля сдвига в сплавах со сверхструктурой DO₁₉

© Е.В. Черных, М.А. Баранов, М.Д. Старостенков

Алтайский государственный технический университет, Барнаул
E-mail: asba@ab.ru

Поступило в Редакцию 2 ноября 2000 г.

С учетом анизотропии кристаллической решетки выполнено компьютерное моделирование энергетических поверхностей сдвига в сплавах Mg₃Cd, Ti₃Al со сверхструктурой DO₁₉. Выявлены стабильные плоские дефекты в базисной плоскости (0001).

Энергетика плоских дефектов сдвигового типа представляет собой важнейшую информацию об условиях протекания пластической деформации. В последнее время наиболее эффективным способом изучения энергетики плоских дефектов является метод компьютерного построения энергетического профиля сдвига (γ -профиля) [1,2]. Наиболее подробно исследованы профили γ -поверхностей в упорядоченных сплавах со сверхструктурами на базе кубических решеток объемно- и гранецентрированных кристаллов (ОЦК и ГЦК) [3–5]. Между тем компьютерному моделированию дефектов в сверхструктурах на основе гексагональных структур с плотной упаковкой (ГПУ решетки) уделялось крайне мало внимания. Традиционное использование сферически симметричных парных межатомных потенциалов оказывается неприменимым при моделировании дефектов в сплавах с ГПУ решеткой узлов, в том смысле, что не удастся получить физически приемлемый спектр значений энергий образования дефектов. В настоящей работе моделирование плоских дефектов выполнено с применением парного полуэмпирического межатомного потенциала для связи типа А–В, отражающего анизотропию кристаллической ГПУ решетки:

$$\varphi_{AB}(r, \theta) = (1 + \zeta_{AB} \cos^2 \theta) \varphi_{M_{AB}}(r),$$

где φ_M — сферически симметричная функция Морза; θ — угол, отсчитываемый от главной оси кристалла; ζ — параметр. Энергетический профиль для сплавов сверхструктуры DO₁₉ состава A₃B рассчитывался при

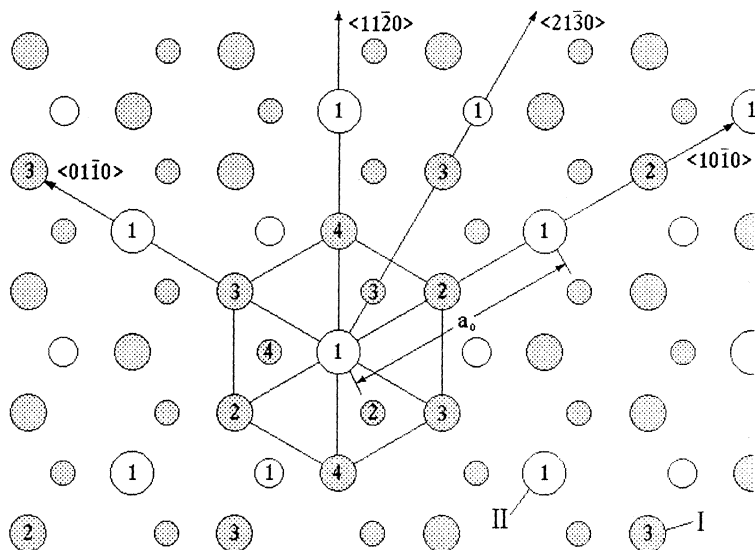


Рис. 1. Проекция сверхструктуры DO_{19} на плоскость (0001) . I — узлы, занятые атомами сорта А, II — сорта В, 1–4 — номера подрешеток. a_0 — параметр решетки.

скольжении полукристалла в базисной плоскости (0001) . Ее атомная конфигурация (рис. 1) представлена четырьмя подрешетками. На рис. 1 положения узлов, принадлежащих подрешеткам 1–4, отмечены соответствующими цифрами. Атомы "нижнего" слоя представлены кружками малого размера. Наиболее вероятными направлениями скольжения в рассматриваемой плоскости являются направления типа $\langle 21\bar{3}0 \rangle$ и $\langle 10\bar{1}0 \rangle$, показанные на рисунке стрелками.

Для расчета потенциального рельефа создавалась стартовая конфигурация дефекта, состоящая в относительном сдвиге полукристаллов на заданный вектор и закреплении их краев. Атомам внутренних областей предоставлялась возможность смещаться в направлении действующих на них сил вплоть до достижения равновесной конфигурации. Рис. 2 иллюстрирует профиль γ -поверхности вдоль направления сдвига $\langle 21\bar{3}0 \rangle$

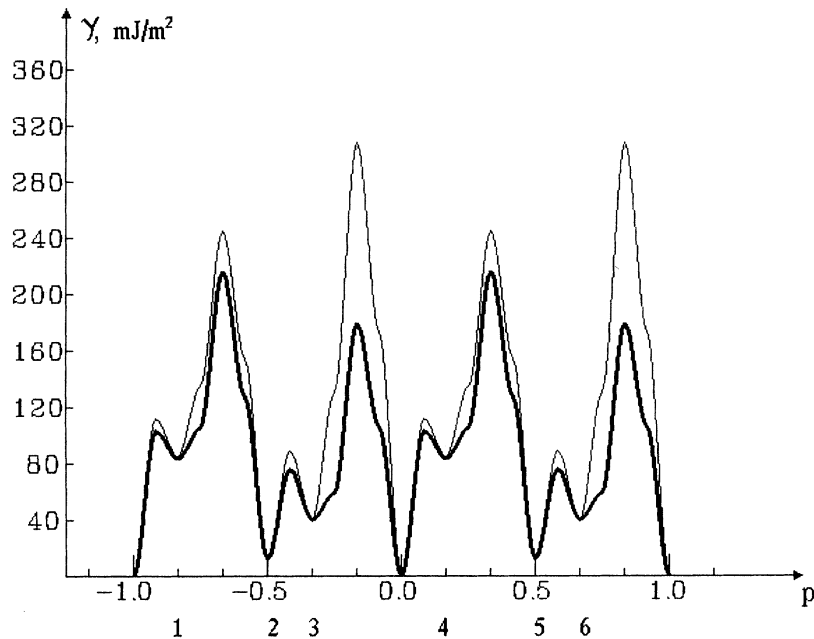


Рис. 2. Зависимость энергетического профиля в сплаве Mg_3Cd от величины вектора сдвига $\rho a_0 \langle 21\bar{3}0 \rangle$ в плоскости (0001) .

в плотноупакованной системе скольжения сплава Mg_3Cd при изменении вектора сдвига от $-a_0 \langle 21\bar{3}0 \rangle$ до $a_0 \langle 21\bar{3}0 \rangle$. Вследствие упорядоченного расположения по узлам сверхструктуры DO_{19} на энергетическом профиле выделяются два квазипериода, соответствующие сдвигу полукристалла от 0 до $a_0/2 \langle 21\bar{3}0 \rangle$ и от 0 до $-a_0/2 \langle 21\bar{3}0 \rangle$. Эти квазипериоды отличаются глубиной энергетических минимумов и высотой потенциальных барьеров, что отражает трансляционную симметрию рассматриваемой сверхструктуры. Стартовая конфигурация дефекта описывается тонкой линией, равновесная — жирной. Сдвиг полукристалла на вектор $a_0/6 \langle 21\bar{3}0 \rangle$ в положение 1 и 4 приводит к образованию локального минимума энергии на кривой, соответствующему сверхструктурному дефекту упаковки (СДУ). Более глубокий минимум возникает при

относительном сдвиге полукристалла на $a_0/2\langle 21\bar{3}0 \rangle$ в положение 2 или 5 и свидетельствует об устойчивом состоянии кристалла, содержащего антифазную границу (АФГ). Дальнейшие сдвиги полукристалла из этого состояния на $a_0/6\langle 21\bar{3}0 \rangle$ в положении 3 или 6 приводят к образованию комплексного дефекта упаковки (КДУ). Очевидно, что сдвиг на полный вектор $\pm a_0\langle 21\bar{3}0 \rangle$ приводит к восстановлению структуры идеальной решетки. Характерно, что энергии образования СДУ ($\sim 100 \text{ mJ/m}^2$) оказываются выше энергий образования АФГ ($\sim 20 \text{ mJ/m}^2$) и КДУ ($\sim 50 \text{ mJ/m}^2$). Полученные значения хорошо согласуются с экспериментально наблюдаемыми АФГ ($\sim 22 \text{ mJ/m}^2$) для Mg_3Cd [6]. В этой связи возможно расщепление СДУ с образованием АФГ и КДУ по следующей схеме дислокационной реакции

$$\frac{1}{6}\langle 21\bar{3}0 \rangle \rightarrow \frac{1}{2}\langle 21\bar{3}0 \rangle \rightarrow -\frac{1}{3}\langle 21\bar{3}0 \rangle.$$

В сплаве Ti_3Al получены близкие значения энергий образования СДУ и КДУ ($\sim 120 \text{ mJ/m}^2$), энергии образования АФГ ($\sim 60 \text{ mJ/m}^2$). Поэтому не следует ожидать взаимных превращений плоских дефектов в этом сплаве в результате дислокационных реакций.

Вид энергетического профиля сдвига в направлениях типа $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ более простой. Здесь выполняются условия трансляционной и зеркальной симметрий, что выражается в одинаковых значениях энергий при сдвиге в противоположных направлениях. Сдвиг на $a_0/2\langle 21\bar{3}0 \rangle$ в сплаве Mg_3Cd приводит к образованию АФГ с энергией $\sim 17 \text{ mJ/m}^2$. Других минимумов не наблюдается. Рассчитанные значения энергий образования плоских дефектов в остальных плоскостях оказываются на порядок выше, что также согласуется с данными [6].

Таким образом, упомянутыми выше дефектами в главной плоскости скольжения (0001) исчерпывается весь набор стабильных плоских дефектов в сверхструктурах на основе ГПУ решетки, что, скорее всего, является следствием ее анизотропии.

Список литературы

- [1] *Ymaguchi M., Umakoshi V.* // Elsevier. 1984. V. 147. P. 131.
- [2] *Paidar V., Lejcek L.* // Elsevier. 1984. V. 147. P. 463.
- [3] *Новичихина Т.И., Баранов М.А., Старостенков М.Д.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 5. С. 81–85.

- [4] *Баранов М.А., Никифоров А.Г., Старостенков М.Д. // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 12. С. 68–71.*
- [5] *Старостенков М.Д., Романенко В.В. // Изв. вузов. Черная металлургия. 1993. № 6. С. 46–48.*
- [6] *Бушнев Л.С., Китаева Л.П. // Кристаллография. 1964. Т. 9. В. 6. С. 879–885.*