

05

## Расчет энергетического профиля сдвига в сплавах со сверхструктурой DO<sub>19</sub>

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

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

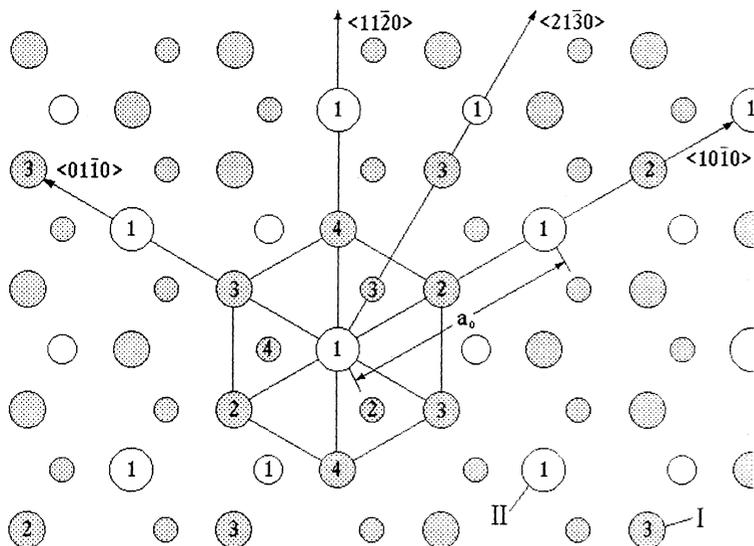
Поступило в Редакцию 2 ноября 2000 г.

С учетом анизотропии кристаллической решетки выполнено компьютерное моделирование энергетических поверхностей сдвига в сплавах Mg<sub>3</sub>Cd, Ti<sub>3</sub>Al со сверхструктурой DO<sub>19</sub>. 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 ( $\gamma$ -профиля) [1,2]. Наиболее подробно исследованы профили  $\gamma$ -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:

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

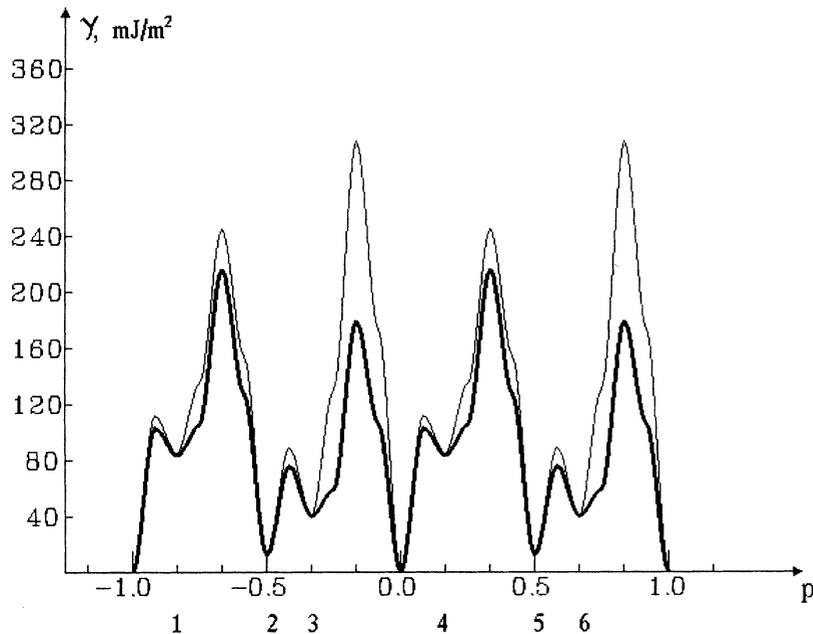
где  $\varphi_M$  — сферически симметричная функция Морза;  $\theta$  — угол, отсчитываемый от главной оси кристалла;  $\zeta$  — параметр. Энергетический профиль для сплавов сверхструктуры DO<sub>19</sub> состава A<sub>3</sub>B рассчитывался при



**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  $\gamma$ -поверхности вдоль направления сдвига  $\langle 21\bar{3}0 \rangle$



**Рис. 2.** Зависимость энергетического профиля в сплаве  $Mg_3Cd$  от величины вектора сдвига  $p a_0 \langle 21\bar{3}0 \rangle$  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  $\text{Mg}_3\text{Cd}$  [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  $\text{Ti}_3\text{Al}$  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  $\text{Mg}_3\text{Cd}$  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.*